AMPLIACIÓN DE FÍSICA DEL ESTADO SÓLIDO

TEMA 2

MODELO SEMICLÁSICO DE LA DINÁMICA ELECTRÓNICA

DERIVACIÓN DE LAS ECUACIONES SEMICLÁSICAS

Electrones en un potencial periódico

$$\vec{v}_n(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar}\vec{\nabla}_{\vec{k}}\varepsilon_n(\vec{k})$$

$\sigma \to \infty$

En realidad, los electrones no están sometidos a un potencial perfectamente periódico

Colisiones

¿Cómo evolucionan los electrones entre colisiones cuando son excitados?

$$H\Psi(\vec{r},t) = i\hbar\frac{\partial\Psi(\vec{r},t)}{\partial t}$$

$$H = \frac{1}{2m_e}\left[\vec{p} + e\vec{A}(\vec{r},t)\right]^2 + U(\vec{r}) - e\phi(\vec{r},t)$$

PROBLEMA COMPLEJO

MODELO SEMICLÁSICO

DERIVACIÓN DE LAS ECUACIONES SEMICLÁSICAS

LOCALIZACIÓN

Electrón Bloch **deslocalizado** con vector de onda $\vec{k}$

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r},t) = u_{\vec{k}}(\vec{r})e^{i\left(\vec{k}\cdot\vec{r}-\frac{\varepsilon t}{\hbar}\right)}$$

Electrón semiclásico **localizado** en $\vec{r}_c$ con vector de onda $\vec{k}_c$

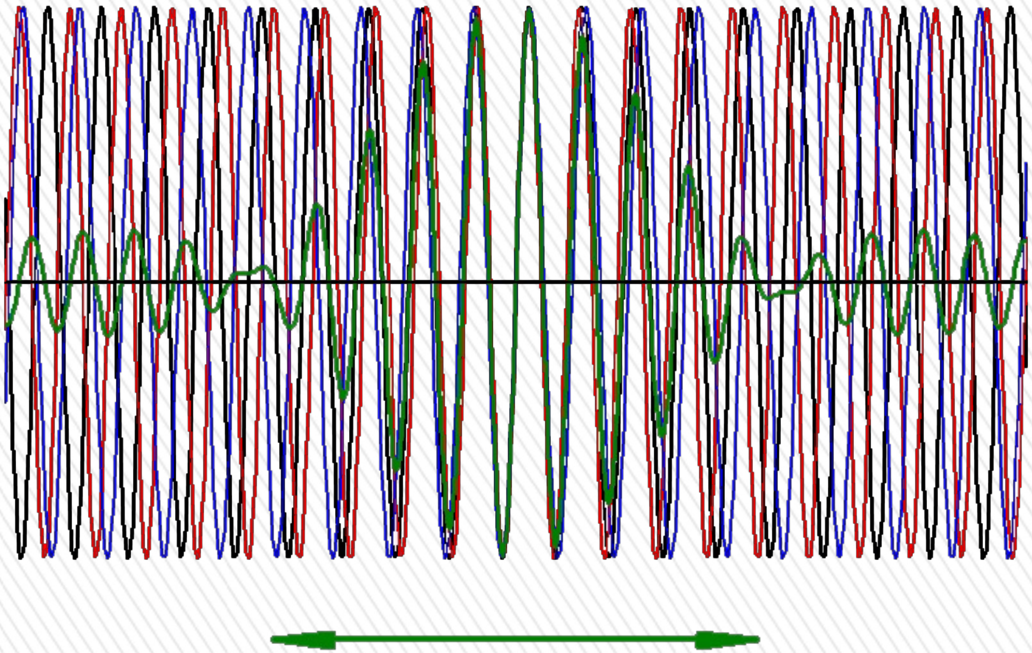
$$\Psi_{\vec{r}_c,\vec{k}_c}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}}\frac{V}{4\pi^3}\int_{ZB} w_{\vec{k}\vec{k}_c} e^{i\left(\frac{e\vec{A}(\vec{r}_c,t)}{\hbar}\cdot\vec{r}-\vec{k}\cdot\vec{r}_c\right)}\psi_{\vec{k}}(\vec{r})d\vec{k}$$

$$\left\langle\Psi_{\vec{r}_c,\vec{k}_c}\middle|\Psi_{\vec{r}_c,\vec{k}_c}\right\rangle = 1 \quad \Rightarrow \quad \boxed{\frac{V}{4\pi^3}\int_{ZB}\left|w_{\vec{k}\vec{k}_c}\right|^2 d\vec{k} = 1}$$

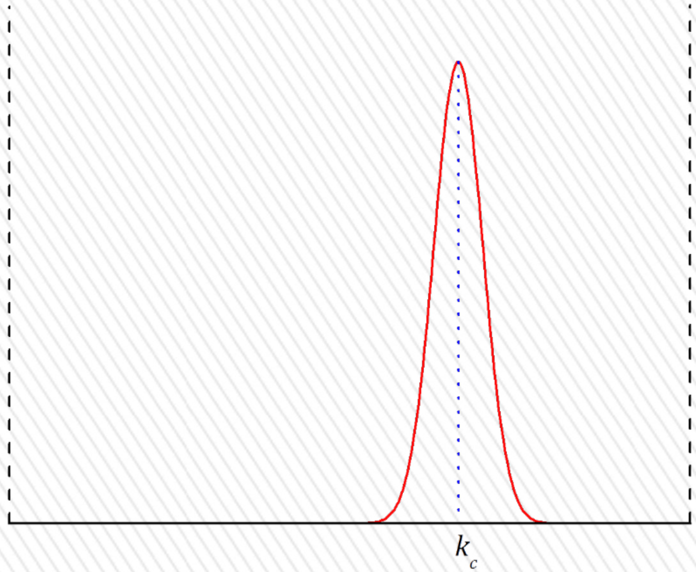
$$\vec{R}_{\vec{k}} = i\int_{\Omega} u^*_{\vec{k}}(\vec{r})\frac{\partial u_{\vec{k}}(\vec{r})}{\partial\vec{k}}d\vec{r} \qquad \boxed{\varphi\left(w_{\vec{k}\vec{k}_c}\right) = e^{i(\vec{k}-\vec{k}_c)\cdot\vec{R}_{\vec{k}}}}$$

DERIVACIÓN DE LAS ECUACIONES SEMICLÁSICAS

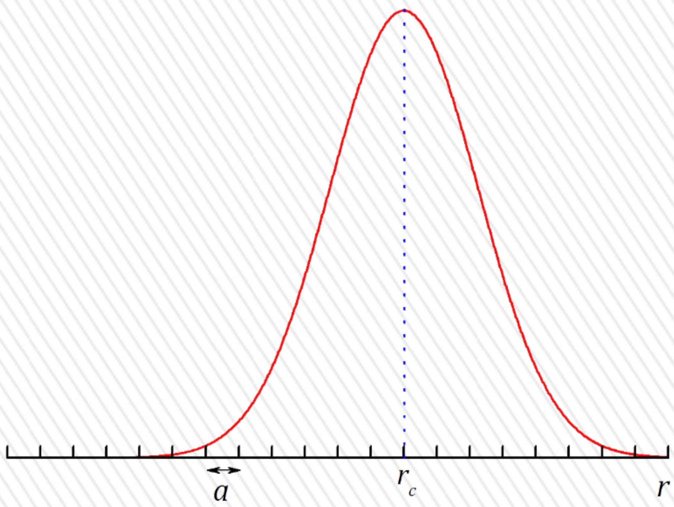
LOCALIZACIÓN



DERIVACIÓN DE LAS ECUACIONES SEMICLÁSICAS



Espacio recíproco



Espacio directo

ECUACIONES DE EHRENFEST

$$\frac{d\vec{r}_c}{dt} = \frac{\partial\langle H\rangle}{\partial(\hbar\vec{k}_c)}$$

$$\frac{d(\hbar\vec{k}_c)}{dt} = -\frac{\partial\langle H\rangle}{\partial\vec{r}_c}$$

DERIVACIÓN DE LAS ECUACIONES SEMICLÁSICAS

$$\langle H\rangle = \left\langle \Psi_{\vec{r}_c,\vec{k}_c}\middle| H \middle|\Psi_{\vec{r}_c,\vec{k}_c}\right\rangle = \varepsilon_{\vec{k}} + \frac{e}{2m_e}\vec{B}\cdot\vec{L}_{\vec{k}_c} - e\phi(\vec{r}_c,t)$$

$$\vec{L}_{\vec{k}_c} = 2\,Re\left[\frac{\hbar}{2}\int_\Omega d\vec{r}\left[\frac{\partial u^*_{\vec{k}_c}}{\partial(i\vec{k}_c)} - \vec{R}_{\vec{k}_c}u^*_{\vec{k}_c}\right]\times\left[\frac{\partial}{\partial(i\vec{r})} + \vec{k}_c\right]u_{\vec{k}_c}\right]$$

$$\hbar\frac{d\vec{k}_c}{dt} = -e\vec{E} - e\frac{d\vec{r}_c}{dt}\times\vec{B}$$

$$\frac{d\vec{r}_c}{dt} = \frac{1}{\hbar}\left[\frac{\partial\varepsilon_{\vec{k}_c}}{\partial\vec{k}_c} + \frac{e}{2m_e}\vec{B}\cdot\frac{\partial\vec{L}_{\vec{k}_c}}{\partial\vec{k}_c}\right] - \frac{d\vec{k}_c}{dt}\times\vec{\Omega}$$

$$\vec{\Omega} = \vec{\nabla}_{\vec{k}}\times\vec{R}(\vec{k})$$

Velocidad anómala

Los términos en $\vec{L}_{\vec{k}_c}$ y $\vec{\Omega}$ se anulan en muchos sólidos

$$\hbar\frac{d\vec{k}}{dt} = -e\left(\vec{E} + \vec{v}\times\vec{B}\right)$$

$$\frac{d\vec{r}}{dt}\left(=\vec{v}(\vec{k})\right) = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial\varepsilon_{\vec{k}}}{\partial\vec{k}}$$

ECUACIONES SEMICLÁSICAS

COMENTARIOS SOBRE LAS ECUACIONES

- La primera ecuación indica que la velocidad del electrón semiclásico es la **velocidad de grupo** de la onda que lo describe.

$$\frac{1}{\hbar}\vec{\nabla}_{\vec{k}}\,\varepsilon(\vec{k}) = \vec{v}_g(\vec{k})$$

- La segunda ecuación indica que la derivada de la cantidad $\hbar\vec{k}$ es igual a **la fuerza asociada a las fuerzas externas.**

Momento cristalino

$$\frac{d(\hbar\vec{k})}{dt} = \frac{d\vec{p}}{dt} - \vec{F}_{red} \qquad \text{(formalmente)}$$

- Sólo los campos externos son tratados clásicamente.

- Algunas consecuencias del teorema de Bloch **siguen siendo válidas**.

$$n,\vec{k} \equiv n,\vec{k}+\vec{G}$$

LÍMITES DE VALIDEZ DEL MODELO

- Los campos no deben variar espacialmente en distancias del orden de varios centenares de celdas unidad.

- La intensidad de los campos no debe dar lugar a transiciones interbandas.

$$eEa \ll \frac{\varepsilon_{gap}(\vec{k})^2}{\varepsilon_F}$$

$$\hbar\omega_c \ll \frac{\varepsilon_{gap}(\vec{k})^2}{\varepsilon_F}$$

La primera condición se cumple aceptablemente bien.

La segunda puede no cumplirse → Ruptura magnética.

- En campos oscilantes, tampoco deben producirse estas transiciones.

$$\hbar\omega \ll \varepsilon_{gap}(\vec{k})$$

METALES, AISLANTES Y LLENADO DE BANDAS

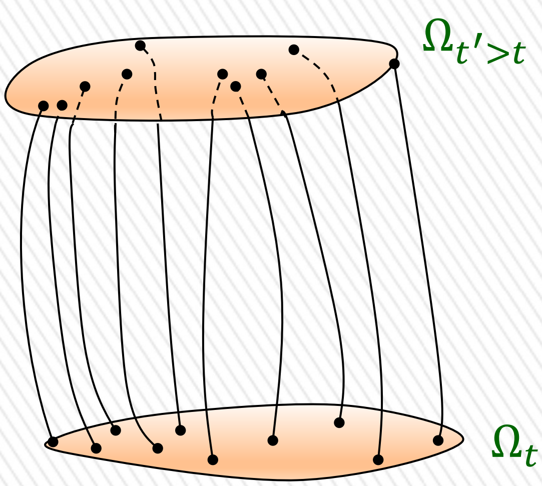
Un sólido con bandas completamente llenas es aislante eléctrico y térmico.

$$g(\vec{r},\vec{k}) = \frac{1}{4\pi^3}$$

Densidad de estados en el espacio fásico rk

Teorema de LIOUVILLE

$g(\vec{r},\vec{k})$ permanece constante



Densidad de corriente

$$\vec{j} = -e\int_{ZB}\frac{1}{4\pi^3}\vec{v}(\vec{k})d\vec{k} = -\frac{e}{4\pi^3\hbar}\int_{ZB}\frac{\partial\varepsilon(\vec{k})}{\partial\vec{k}}d\vec{k} \equiv \vec{0}$$

Flujo de calor

$$\vec{j}_\varepsilon = \int_{ZB}\frac{1}{4\pi^3}\vec{v}(\vec{k})\varepsilon(\vec{k})d\vec{k} =$$

$$= \frac{1}{2\hbar}\frac{1}{4\pi^3}\int_{ZB}\frac{\partial}{\partial\vec{k}}\left[\varepsilon(\vec{k})\right]^2 d\vec{k} \equiv \vec{0}$$

MASA EFECTIVA

Aceleración de un electrón Bloch

$$\vec{a}(\vec{k}) = \frac{d\vec{v}(\vec{k})}{dt} = \frac{1}{\hbar}\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial \varepsilon(\vec{k})}{\partial \vec{k}}\right)$$

$$a_i(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar}\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial \varepsilon(\vec{k})}{\partial k_i}\right) =$$

$$= \frac{1}{\hbar}\left(\frac{d\vec{k}}{dt}\cdot\frac{\partial}{\partial \vec{k}}\right)\frac{\partial \varepsilon(\vec{k})}{\partial k_i} = \frac{1}{\hbar^2}\sum_j \left(\frac{\partial^2 \varepsilon(\vec{k})}{\partial k_i \partial k_j}\right)\frac{d(\hbar k_j)}{dt}$$

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

Tensor masa efectiva

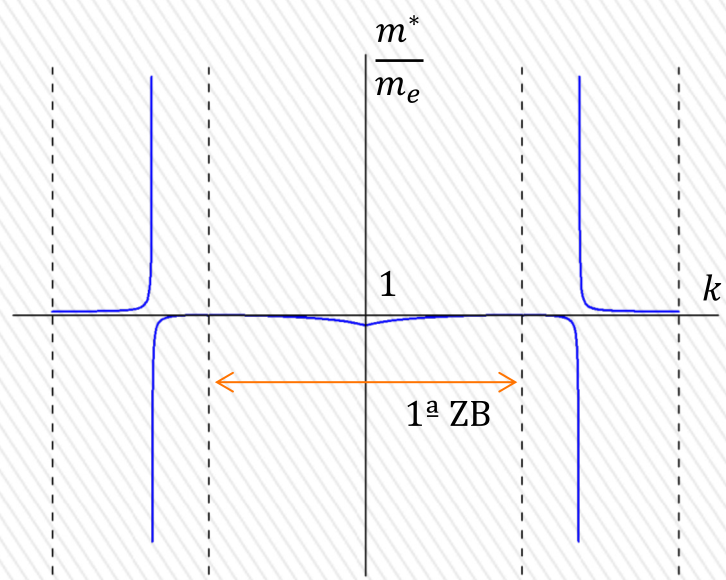
$$\vec{a}(\vec{k}) = \hat{m}^{*-1}(\vec{k})\vec{F}^{ext}$$

En el entorno del extremo de una banda:

$$\varepsilon(\vec{k}) \approx \varepsilon(\vec{k}_0) + \frac{1}{2}\sum_{ij}\left(\frac{\partial^2 \varepsilon(\vec{k})}{\partial k_i \partial k_j}\right)\Bigg|_{\vec{k}_0}(k_i - k_{0i})(k_j - k_{0j}) =$$

$$= \varepsilon(\vec{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2}\sum_{ij}(m^*)^{-1}_{ij}\Big|_{\vec{k}_0}(k_i - k_{0i})(k_j - k_{0j}) =$$

$$= \varepsilon(\vec{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2}\left[\frac{(k_x - k_{0x})^2}{m^*_{xx}} + \frac{(k_y - k_{0y})^2}{m^*_{yy}} + \frac{(k_z - k_{0z})^2}{m^*_{zz}}\right]$$



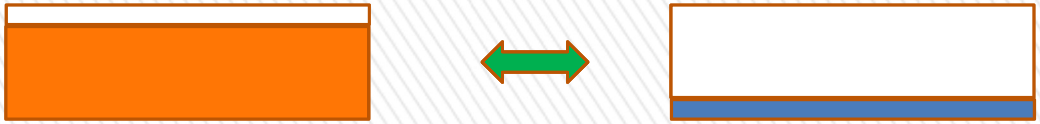
HUECOS ELECTRÓNICOS

Densidad de corriente en un metal $\qquad \vec{j} = -\frac{e}{4\pi^3}\int_{ocupados} \vec{v}(\vec{k})d\vec{k}$

$$\frac{1}{4\pi^3}\int_{Banda} \vec{v}(\vec{k})d\vec{k} = \frac{1}{4\pi^3}\int_{ocupados} \vec{v}(\vec{k})d\vec{k} + \frac{1}{4\pi^3}\int_{no\ ocupados} \vec{v}(\vec{k})d\vec{k} = \vec{0}$$

$$\boxed{\vec{j} = +\frac{e}{4\pi^3}\int_{no\ ocupados} \vec{v}(\vec{k})d\vec{k}}$$

HUECO ELECTRÓNICO



Descripciones alternativas

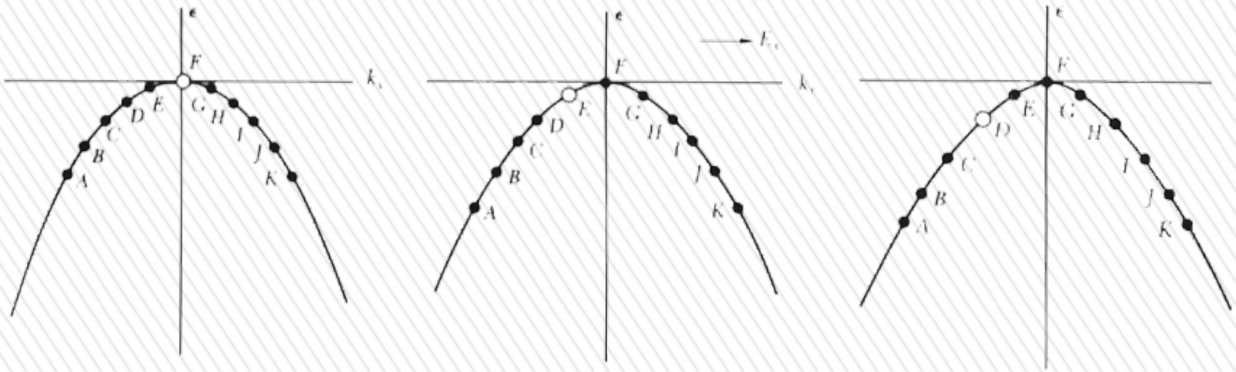
HUECOS ELECTRÓNICOS

PROPIEDADES FÍSICAS DE LOS HUECOS

Vector de onda $\frac{1}{4\pi^3}\int_{ZB}\vec{k}\,d\vec{k} = 0$ → $\boxed{\vec{k}_h = -\vec{k}_e}$

Energía $\boxed{\varepsilon_h(\vec{k}_h) = -\varepsilon_e(\vec{k}_e)}$

Velocidad $\boxed{\vec{v}_h(\vec{k}_h) = \vec{v}_e(\vec{k}_e)}$



Masa efectiva $\boxed{m_h^* = -m_e^*}$

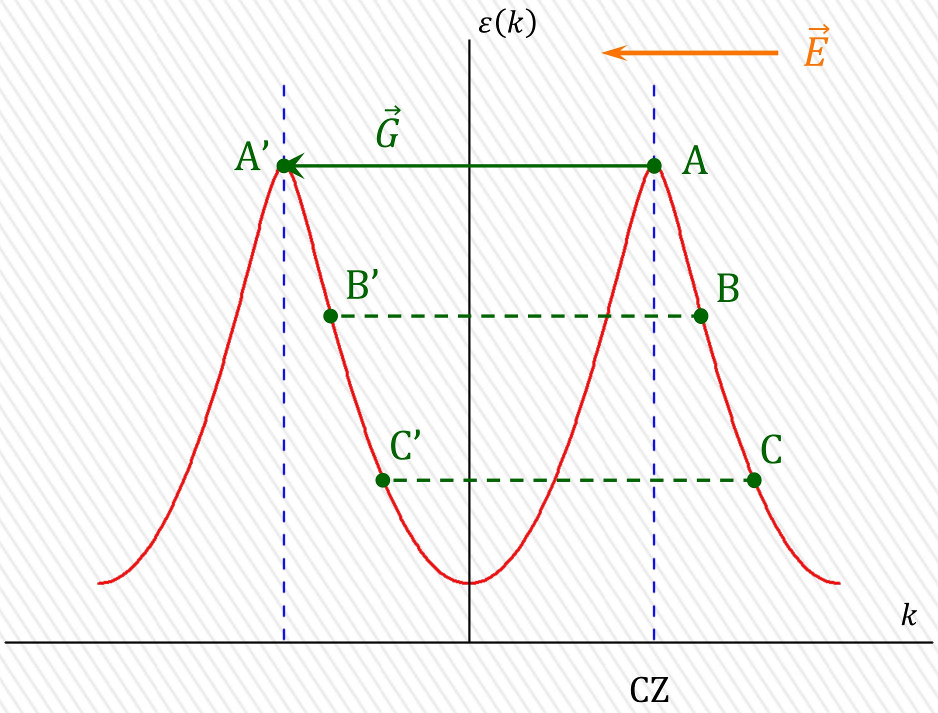
Segunda ecuación semiclásica $\boxed{\hbar\frac{d\vec{k}_h}{dt} = e[\vec{E} + \vec{v}_h(\vec{k}_h)\times\vec{B}]}$

CAMPOS ELÉCTRICOS ESTÁTICOS

$$\hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = -e\vec{E}$$

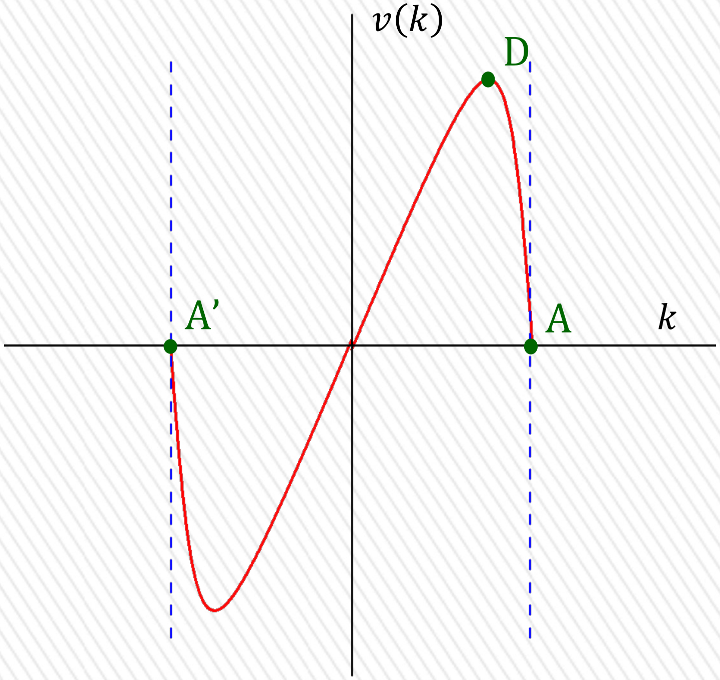
$$\vec{k}(t) - \vec{k}(t_1) = -\frac{e\vec{E}}{\hbar}(t - t_1)$$

El módulo del vector de onda no puede crecer indefinidamente en el tiempo



OSCILACIONES DE BLOCH

CAMPOS ELÉCTRICOS ESTÁTICOS



$$T_B = \frac{2\pi\hbar}{eEa}$$

Desplazamiento del electrón en el espacio directo

$$x(t) - x(t_1) = -\frac{1}{eE}\{\varepsilon[k(t)] - \varepsilon[k(t_1)]\}$$

$$\boxed{\Delta x_{max} = \frac{\Delta\varepsilon}{eE}}$$

Muy difíciles de observar experimentalmente

CAMPOS MAGNÉTICOS ESTÁTICOS

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

$$\hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = -e\vec{v}(\vec{k}) \times \vec{B}$$

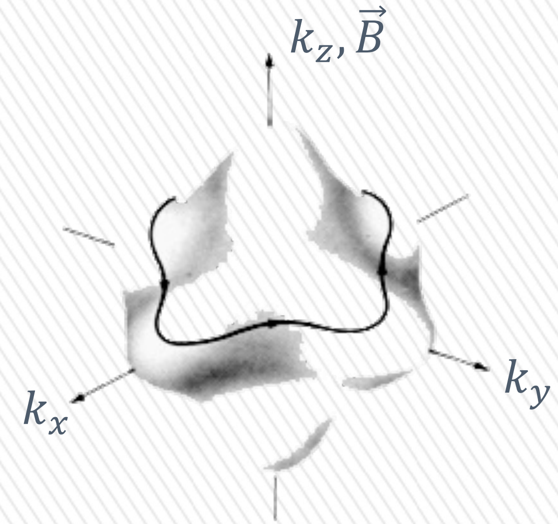
✓ La energía del electrón es constante

$$\frac{d\varepsilon(\vec{k})}{dt} = \frac{\partial \varepsilon(\vec{k})}{\partial \vec{k}} \cdot \frac{d\vec{k}}{dt}$$
$$= -e\vec{v}(\vec{k}) \cdot [\vec{v}(\vec{k}) \times \vec{B}] = 0$$

✓ La componente de $\vec{k}$ en la dirección del campo es constante

$$\left(\frac{d\vec{k}}{dt}\right)_{\parallel} = \{-e[\vec{v}(\vec{k}) \times \vec{B}] \cdot \hat{B}\} \cdot \hat{B} = \vec{0}$$

La trayectoria del electrón es la curva intersección de las superficies isoenergéticas con planos perpendiculares al campo magnético.



Los electrones recorren las órbitas de forma que los niveles más energéticos están a la derecha.

Los huecos las recorren en sentido contrario.

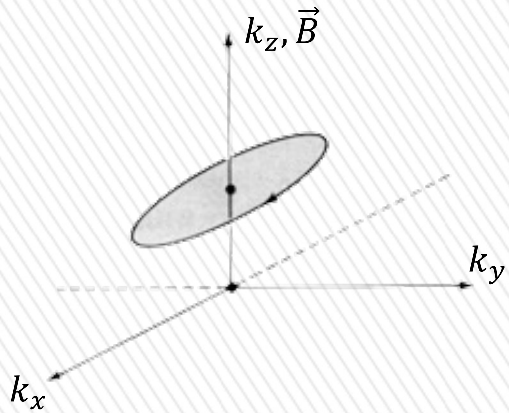
CAMPOS MAGNÉTICOS ESTÁTICOS

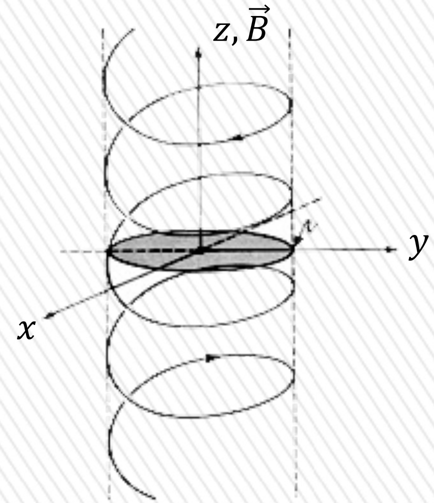
Trayectoria del electrón en el espacio directo

$$\vec{r}_\perp = \vec{r} - \hat{B}(\hat{B}\cdot\vec{r})$$

$$\hat{B}\times\hbar\frac{d\vec{k}}{dt} = -eB\left[\frac{d\vec{r}}{dt} - \hat{B}\left(\hat{B}\cdot\frac{d\vec{r}}{dt}\right)\right] = -eB\frac{d\vec{r}_\perp}{dt}$$

$$\vec{r}_\perp(t) - \vec{r}_\perp(t_0) = -\frac{\hbar}{eB}\hat{B}\times\left[\vec{k}(t) - \vec{k}(t_0)\right]$$





CAMPOS ESTÁTICOS CRUZADOS

Trayectoria del electrón en el espacio directo

$$\vec{r}_{\perp}(t) - \vec{r}_{\perp}(0) = -\frac{\hbar}{eB}\hat{B}\times\left[\vec{k}(t) - \vec{k}(0)\right] + \vec{w}t$$

$$\vec{w} = \frac{E}{B}\left(\hat{E}\times\hat{B}\right)$$

La proyección perpendicular de la trayectoria es la superposición de la del caso puramente magnético y de un término de arrastre proporcional a $\vec{w}$.

Trayectoria del electrón en el espacio recíproco

$$\hbar\frac{d\vec{k}}{dt} = -\frac{e}{\hbar}\frac{\partial\bar{\varepsilon}\left(\vec{k}\right)}{\partial\vec{k}}\times\vec{B}$$

$$\bar{\varepsilon}\left(\vec{k}\right) = \varepsilon\left(\vec{k}\right) - \hbar\vec{k}\cdot\vec{w}$$