



FÍSICA DEL ESTADO SÓLIDO



TEMA 2 **TEORÍA DE BANDAS**

CONTENIDO

Enlace cristalino

El enlace metálico

Teoría de bandas

Hamiltoniano del sólido: aproximaciones

Teorema de Bloch

Consecuencias del teorema de Bloch

Densidad de estados

Estado fundamental del sólido:
superficie de Fermi

Temperaturas finitas

Modelo de electrones libres

Relación de dispersión

Superficie de Fermi

Densidad de estados

Modelo de electrones cuasi-libres

Relación de dispersión

Bandas de energía

Masa efectiva

Huecos electrónicos

ENLACE CRISTALINO

Enlace cristalino vs. enlace molecular

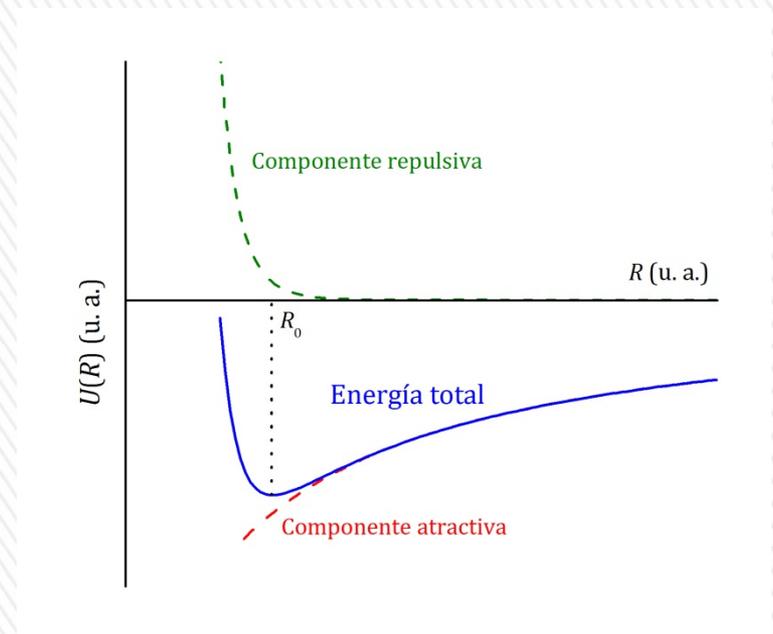
Balance entre dos tipos de interacciones

Atractiva -> Carácter electrostático

Repulsiva -> Principio de exclusión

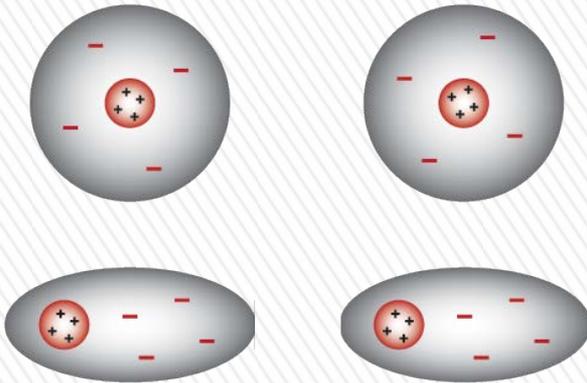
La contribución repulsiva es universal

La contribución atractiva determina el tipo de enlace

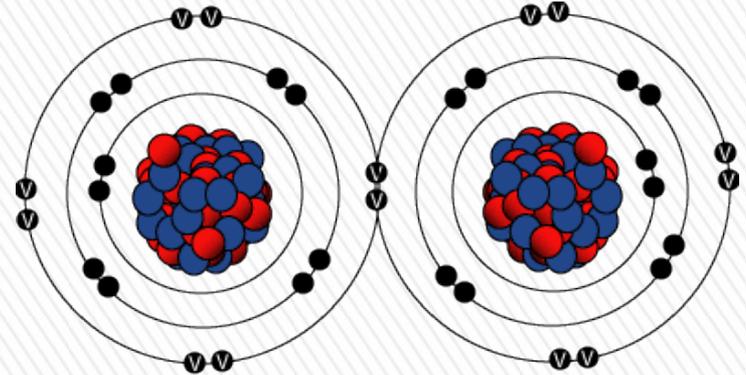


ENLACE CRISTALINO

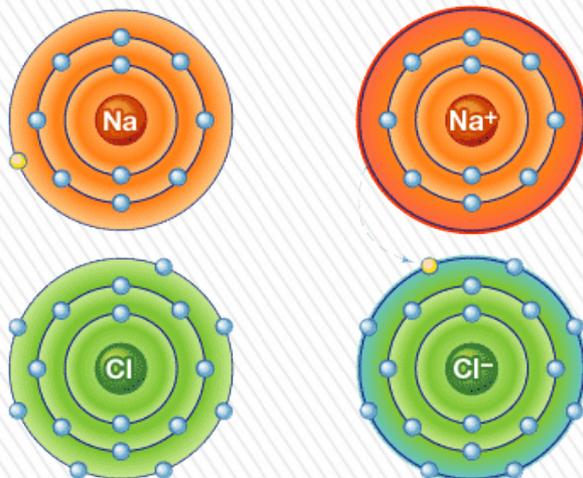
van der Waals -> Enlace molecular



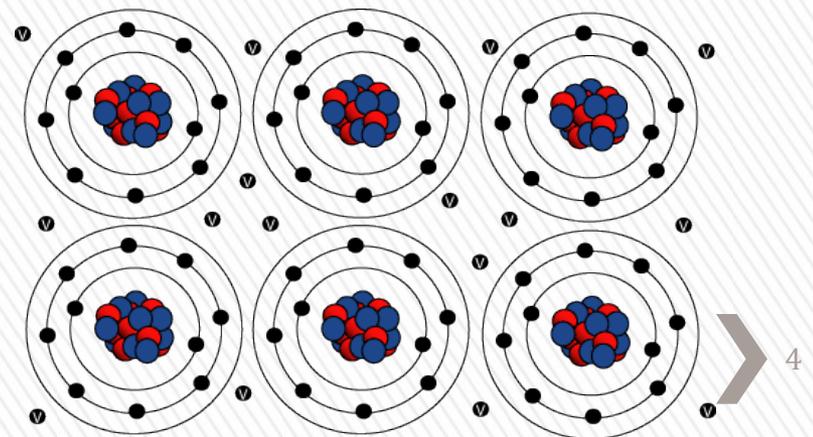
Intercambio -> Enlace covalente



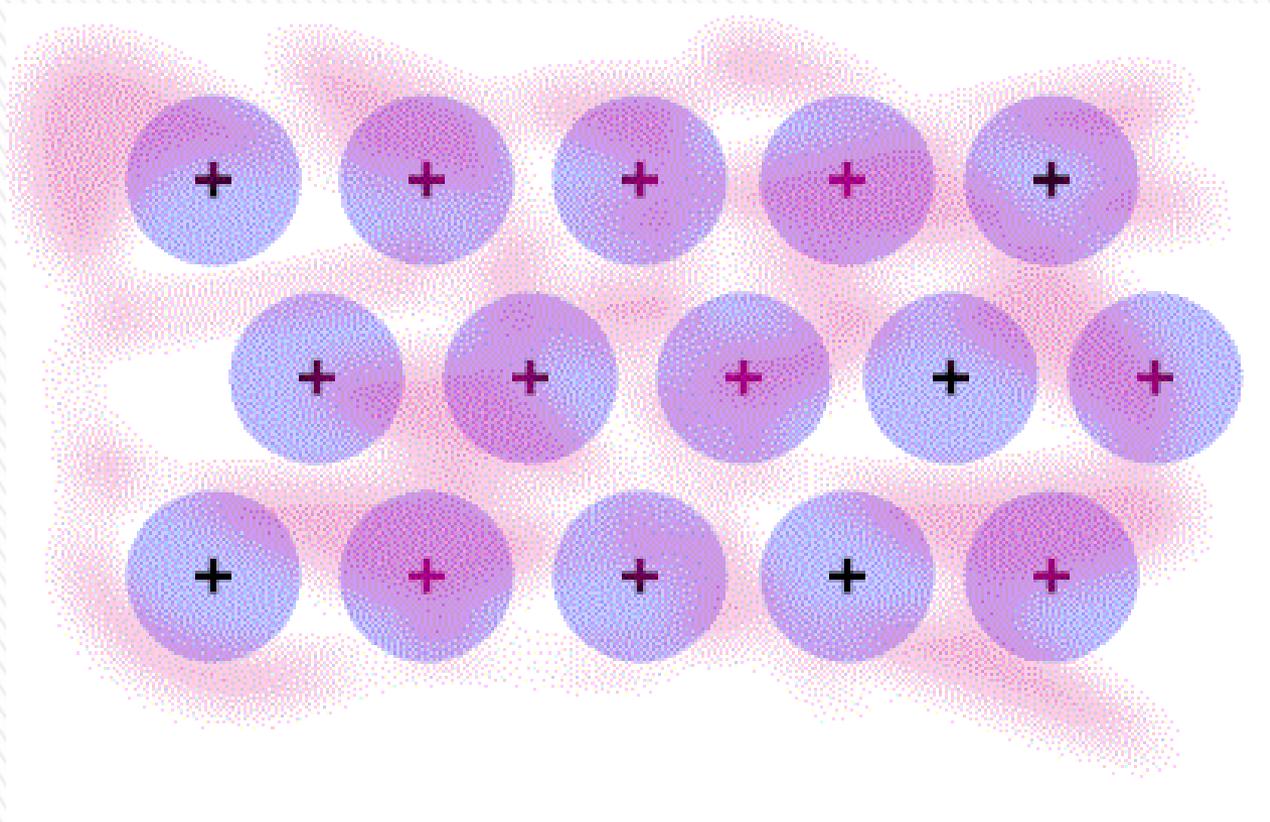
Coulomb -> Enlace iónico



Colectiva -> Enlace metálico



ENLACE CRISTALINO



HAMILTONIANO DEL SÓLIDO

$$H = T_N(\{\vec{P}_j\}) + T_e(\{\vec{p}_i\}) + U_N(\{\vec{R}_j\}) + U_e(\{\vec{r}_i\}) + U_{eN}(\{\vec{R}_j\}, \{\vec{r}_i\})$$

¡FORMIDABLE!

APROXIMACIÓN DE VALENCIA

Sólo los electrones de valencia de los átomos individuales forman parte del gas de electrones

$$H = T_{PR}(\{\vec{P}_j\}) + T_e(\{\vec{p}_i\}) + U_{PR}(\{\vec{R}_j\}) + U_e(\{\vec{r}_i\}) + U_{e-PR}(\{\vec{R}_j\}, \{\vec{r}_i\})$$

APROXIMACIÓN DE BORN - OPPENHEIMER

Las dinámicas de los electrones y de las partículas reticulares están desacopladas

$$H_e = T_e(\{\vec{p}_i\}) + U_e(\{\vec{r}_i\}) + U_{ePR}(\{\vec{r}_i\}, \{\vec{R}_j^0\}) + H_{PR}^0(\{\vec{P}_j^0, \vec{R}_j^0\})$$

$$H_{PR} = T_{PR}(\{\vec{P}_j\}) + U_{PR}(\{\vec{R}_j\}) + U_{ePR}(\{\vec{R}_j\}, \{\vec{r}_i^0\}) + H_e^0(\vec{p}_i^0, \vec{r}_i^0)$$

APROXIMACIÓN MONOPARTICULAR

Cada problema de N cuerpos se expresa como N problemas de un solo cuerpo

$$H_e = T_e(\vec{p}_i) + U'_e(\vec{r}_i) + U_{ePR}(\vec{r}_i, \{\vec{R}_j^0\})$$

$$H_{PR} = T_{PR}(\vec{P}_j) + U'_{PR}(\vec{R}_j) + U_{ePR}(\vec{R}_j, \{\vec{r}_i^0\})$$

TEOREMA DE BLOCH

$$H_e = T_e(\vec{p}_i) + U'_e(\vec{r}_i) + U_{ePR}(\vec{r}_i, \{\vec{R}_j^0\})$$

$$H_i\Psi_i(\vec{r}_i, t) = i\hbar\frac{\partial\Psi_i(\vec{r}_i, t)}{\partial t}$$

Soluciones estacionarias

$$\Psi_i(\vec{r}_i, t) = \psi_i(\vec{r}_i)e^{-i\varepsilon_it/\hbar}$$

$$H_i\psi_i(\vec{r}_i) = \varepsilon_i\psi_i(\vec{r}_i)$$

Condiciones de contorno

$$\psi(x, y, z) = \psi(x + L_x, y, z)$$

$$\psi(x, y, z) = \psi(x, y + L_y, z)$$

$$\psi(x, y, z) = \psi(x, y, z + L_z)$$

Periódicas

Electrones independientes

El potencial de interacción con las partículas reticulares es periódico.

Las soluciones de la ecuación de Schrödinger con CC periódicas son:

TEOREMA DE BLOCH

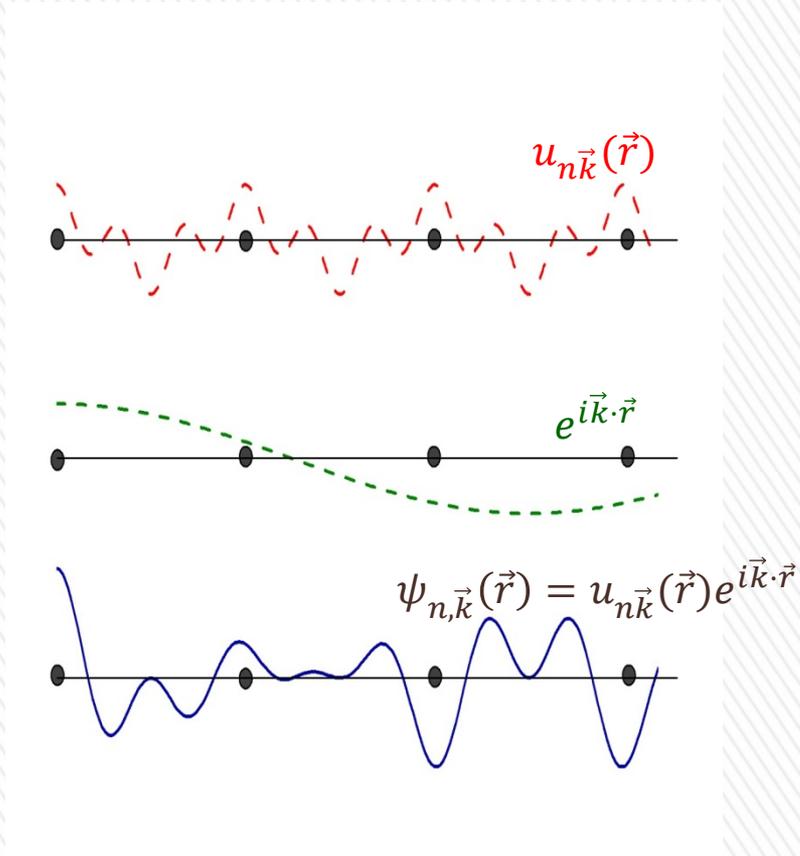
$$\psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = u_{n,\vec{k}}(\vec{r})e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

$$u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = u_{n,\vec{k}}(\vec{r} + \vec{t})$$



TEOREMA DE BLOCH

Forma de las funciones de onda



Aplicación de las condiciones de contorno

$$\psi_{n, \vec{k}}(x, y, z) = \psi_{n, \vec{k}}(x + L_x, y, z)$$

$$\begin{aligned} u_{n, \vec{k}}(x, y, z) e^{i(k_x x + k_y y + k_z z)} &= \\ = u_{n, \vec{k}}(x, y, z) e^{i(k_x x + k_y y + k_z z)} e^{i k_x L_x} \end{aligned}$$

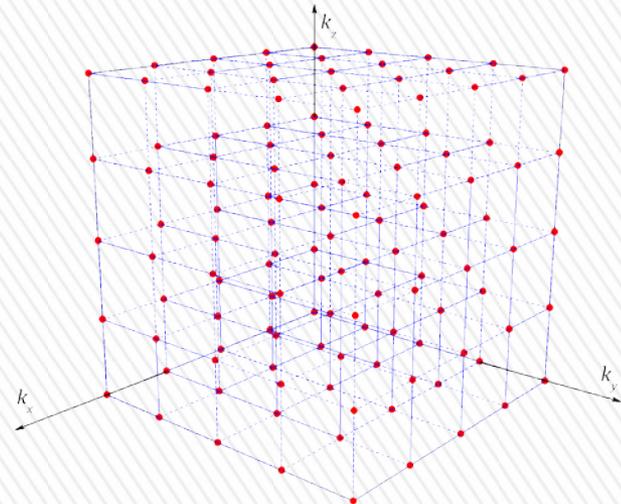
$$e^{i k_x L_x} = 1$$



$$k_x = \frac{2\pi}{L_x} n_x$$

$$k_y = \frac{2\pi}{L_y} n_y$$

$$k_z = \frac{2\pi}{L_z} n_z$$



DEMOSTRACIÓN DEL TEOREMA

El potencial es periódico

$$U(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}'} U(\vec{G}') e^{i\vec{G}' \cdot \vec{r}} \quad U(\vec{G}')^* = U(-\vec{G}')$$

Las ondas planas constituyen una base del espacio de funciones

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}'} \psi_{\vec{k}'}(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}'} c(\vec{k}') e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}}$$

Término de energía cinética:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 \psi(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}'} \frac{\hbar^2 \vec{k}'^2}{2m_e} c(\vec{k}') e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}}$$

Término de energía potencial:

$$U(\vec{r})\psi(\vec{r}) = \left(\sum_{\vec{G}'} U(\vec{G}') e^{i\vec{G}' \cdot \vec{r}} \right) \left(\sum_{\vec{k}'} c(\vec{k}') e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}} \right) = \sum_{\vec{G}', \vec{k}'} U(\vec{G}') c(\vec{k}') e^{i(\vec{G}'+\vec{k}') \cdot \vec{r}} = \sum_{\vec{G}', \vec{k}'} U(\vec{G}') c(\vec{k}' - \vec{G}') e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}}$$

$$\sum_{\vec{k}'} \left[\left(\frac{\hbar^2 \vec{k}'^2}{2m_e} - \varepsilon \right) c(\vec{k}') + \sum_{\vec{G}'} U(\vec{G}') c(\vec{k}' - \vec{G}') \right] e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}} = 0$$

$$\left(\frac{\hbar^2 \vec{k}'^2}{2m_e} - \varepsilon \right) c(\vec{k}') + \sum_{\vec{G}'} U(\vec{G}') c(\vec{k}' - \vec{G}') = 0$$



DEMOSTRACIÓN DEL TEOREMA

Restricción a la primera zona de Brillouin

$$\vec{k}' = \vec{k} + \vec{G}$$

\vec{k} pertenece a la ZB
 \vec{G} es un vector de la red recíproca

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m_e} (\vec{k} + \vec{G})^2 - \varepsilon \right] c(\vec{k} + \vec{G}) + \sum_{\vec{G}'} U(\vec{G} - \vec{G}') c(\vec{k} + \vec{G}') = 0$$

$\forall \vec{G}$ de la red recíproca

ECUACIÓN CENTRAL

La ecuación central relaciona una componente $c(\vec{k})$ con las componentes $c(\vec{k} + \vec{G})$, $c(\vec{k} + \vec{G}')$, $c(\vec{k} + \vec{G}'')$, ... que difieren de ella en vectores de la red recíproca

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} c(\vec{k} + \vec{G}) e^{i(\vec{k} + \vec{G}) \cdot \vec{r}} = \sum_{\vec{G}} \left[c(\vec{k} + \vec{G}) e^{i\vec{G} \cdot \vec{r}} \right] e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \equiv u_{\vec{k}}(\vec{r}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$$

$$u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{t}) = \sum_{\vec{G}} c(\vec{k} + \vec{G}) e^{i\vec{G} \cdot (\vec{r} + \vec{t})} = \left[\sum_{\vec{G}} c(\vec{k} + \vec{G}) e^{i\vec{G} \cdot \vec{r}} \right] e^{i\vec{G} \cdot \vec{t}} = u_{\vec{k}}(\vec{r})$$

Q. E. D.

CONSECUENCIAS DEL TEOREMA DE BLOCH (I)

SIGNIFICADO FÍSICO DE \vec{k}

$$\underbrace{-i\hbar\vec{\nabla}}_{\hat{p}}\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = -i\hbar\vec{\nabla}\left[u_{\vec{k}}(\vec{r})e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\right] = \hbar\vec{k}\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) - i\hbar e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\vec{\nabla}u_{\vec{k}}(\vec{r})$$

$\hbar\vec{k}$ **no es el momento del electrón**. Sin embargo, en procesos de interacción se comporta como si lo fuera

MOMENTO CRISTALINO

SIMETRÍAS DE LAS FUNCIONES DE ONDA

En el espacio recíproco:

$$\begin{aligned}\psi_{\vec{k}+\vec{G}}(\vec{r}) &= \sum_{\vec{G}'} \left[c(\vec{k} + \vec{G} + \vec{G}') e^{i\vec{G}'\cdot\vec{r}} \right] e^{i(\vec{k}+\vec{G})\cdot\vec{r}} = \sum_{\vec{G}'} \left[c[\vec{k} + (\vec{G}' + \vec{G})] e^{i(\vec{G}'+\vec{G})\cdot\vec{r}} \right] e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = \\ &= \sum_{\vec{G}''} \left[c(\vec{k} + \vec{G}'') e^{i\vec{G}''\cdot\vec{r}} \right] e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = \psi_{\vec{k}}(\vec{r})\end{aligned}$$

En el espacio directo:

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{t}) = u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{t}) e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}+\vec{t})} = u_{\vec{k}}(\vec{r}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{t}} = \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{t}}$$

CONSECUENCIAS DEL TEOREMA DE BLOCH (II)

SIMETRÍAS DE LAS ENERGÍAS

$$H_{\vec{k}}\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \varepsilon(\vec{k})\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$$

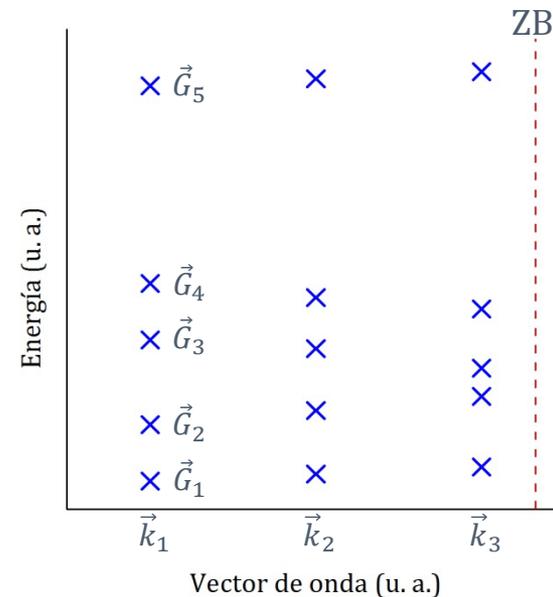
$$H_{\vec{k}+\vec{G}}\psi_{\vec{k}+\vec{G}}(\vec{r}) = \varepsilon(\vec{k} + \vec{G})\psi_{\vec{k}+\vec{G}}(\vec{r}) = \varepsilon(\vec{k} + \vec{G})\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = H_{\vec{k}}\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \varepsilon(\vec{k})\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$$

$$\varepsilon(\vec{k}) = \varepsilon(\vec{k} + \vec{G})$$

SIGNIFICADO FÍSICO DE n

Para un vector de onda dado (dentro de la ZB), existe más de una solución para la ecuación de Schrödinger

$$\psi_{n,\vec{k}}(\vec{r})$$



CONSECUENCIAS DEL TEOREMA DE BLOCH (III)

BANDAS DE ENERGÍA

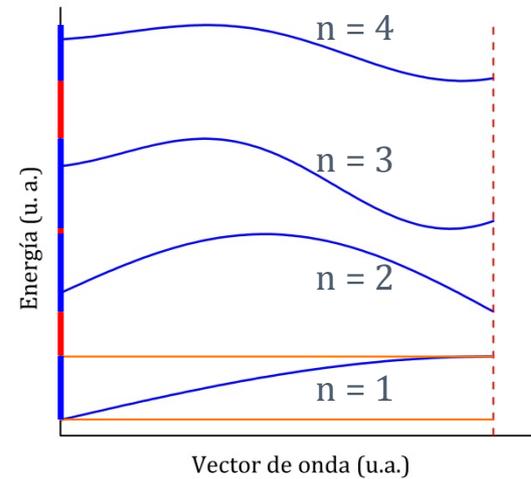
Los vectores de onda en la ZB forman un conjunto cuasi-continuo. Las energías son entonces funciones continuas del vector de onda.

$$\varepsilon_n(\vec{k})$$

n-ésima banda de energía

$$\{\varepsilon_n(\vec{k})\}$$

Estructura de bandas



Bandas prohibidas

VELOCIDAD DE LOS ELECTRONES

$$\vec{v}_n(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar} \left(\frac{\partial \varepsilon_n(\vec{k})}{\partial \vec{k}} \right)$$

Un electrón en una banda dada tiene una velocidad estacionaria. Como consecuencia, **la conductividad eléctrica de un sólido ideal es infinita.**

CONSECUENCIAS DEL TEOREMA DE BLOCH (IV)

ESQUEMAS DE ZONAS

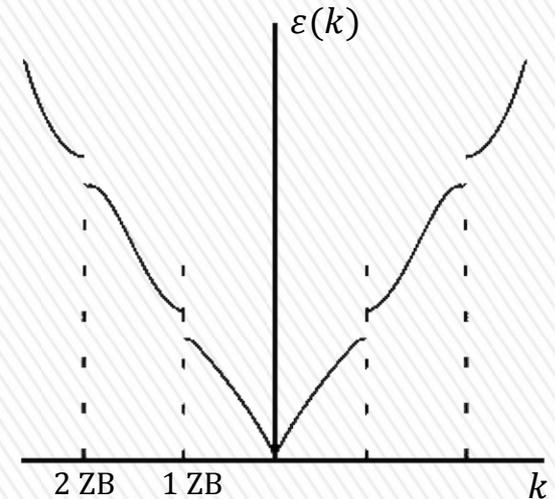
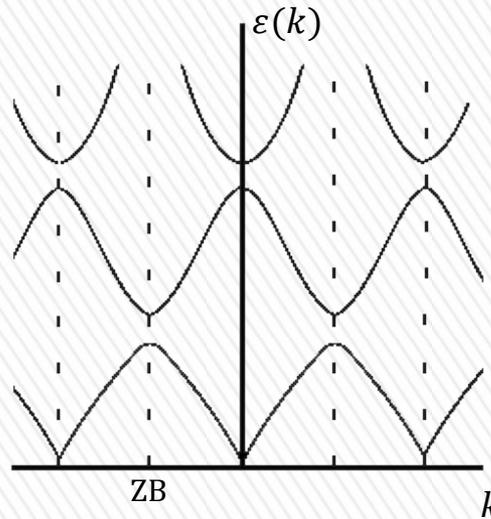
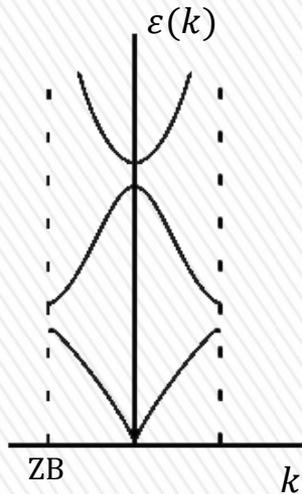
Vector de onda en la primera zona de Brillouin

Vector de onda variando en todo el espacio recíproco

Esquema reducido de zona

Esquema periódico de zona

Esquema extendido de zona



DENSIDAD DE ESTADOS

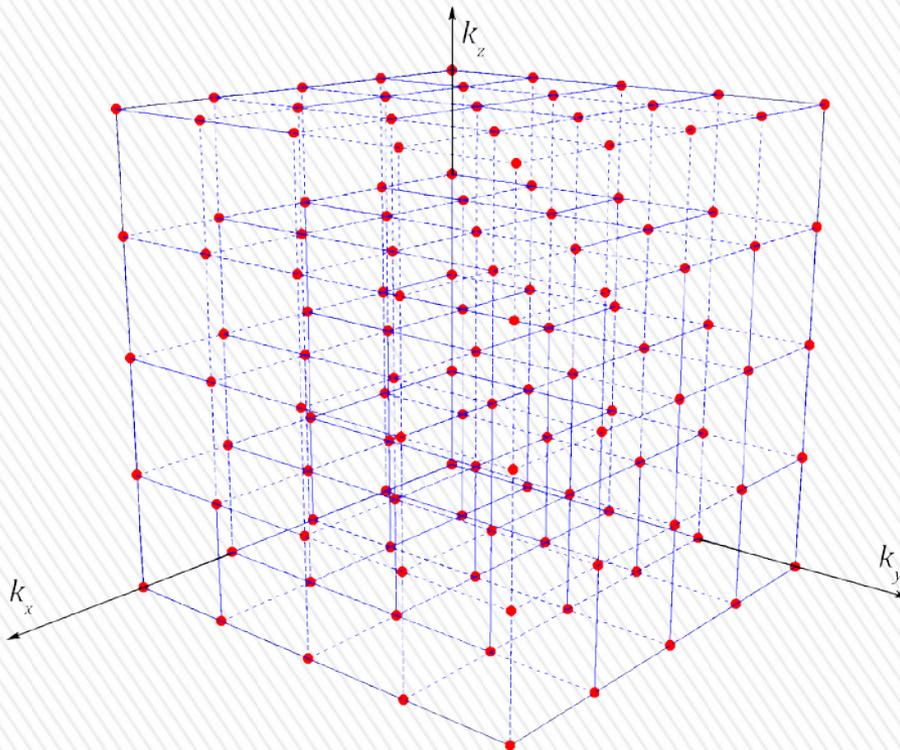
Las energías electrónicas pueden ser degeneradas

DENSIDAD DE ESTADOS EN EL
ESPACIO RECÍPROCO $D(\vec{k})$

Número de estados electrónicos por unidad de
volumen del espacio recíproco

$$D(\vec{k}) = \frac{2 \text{ estados}}{\frac{(2\pi)^3}{V}}$$

$$D(\vec{k}) = \frac{V}{4\pi^3}$$



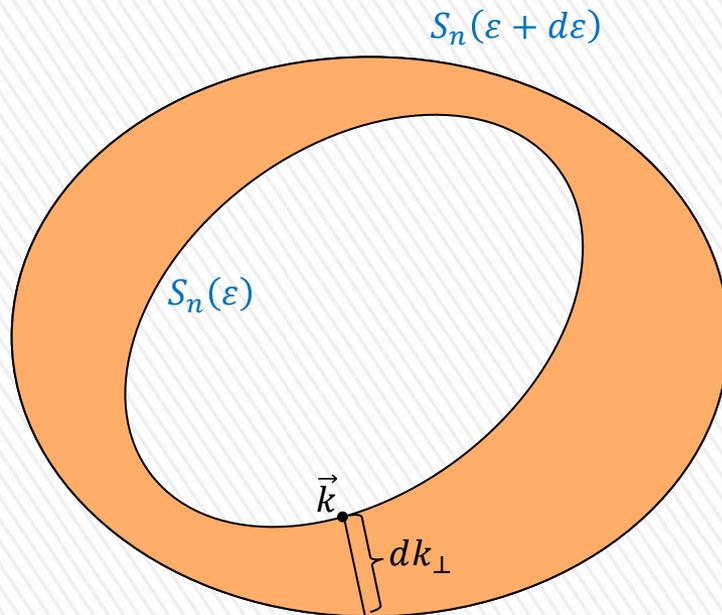
Válida siempre que se utilicen
**condiciones de contorno
periódicas.**

Los vectores de onda forman un
conjunto quasi-continuo

DENSIDAD DE ESTADOS

DENSIDAD DE ESTADOS EN LA ESCALA DE ENERGÍAS $D_n(\varepsilon)$

$D_n(\varepsilon)d\varepsilon$ es el número de estados con energías entre ε y $\varepsilon + d\varepsilon$ en la banda n -ésima.



$$D_n(\varepsilon)d\varepsilon = D(\vec{k})dV^* = \frac{V}{4\pi^3} \int_{S_n(\varepsilon)} dS dk_{\perp}$$

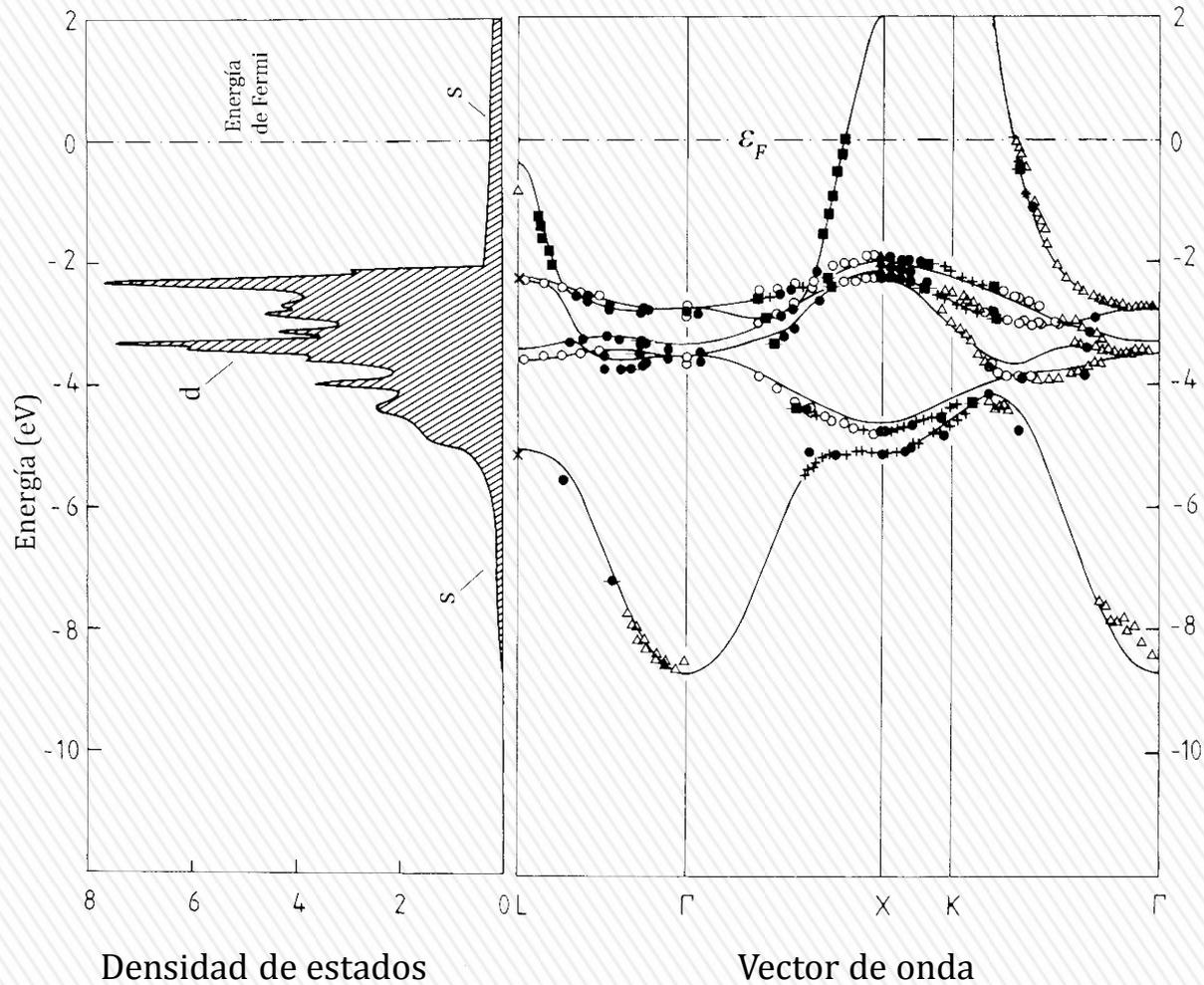
$$d\varepsilon = \vec{\nabla}_{\vec{k}} \varepsilon_n(\vec{k}) \cdot d\vec{k} = |\vec{\nabla}_{\vec{k}} \varepsilon_n(\vec{k})| dk_{\perp}$$

$$dk_{\perp} = \frac{d\varepsilon}{|\vec{\nabla}_{\vec{k}} \varepsilon_n(\vec{k})|}$$

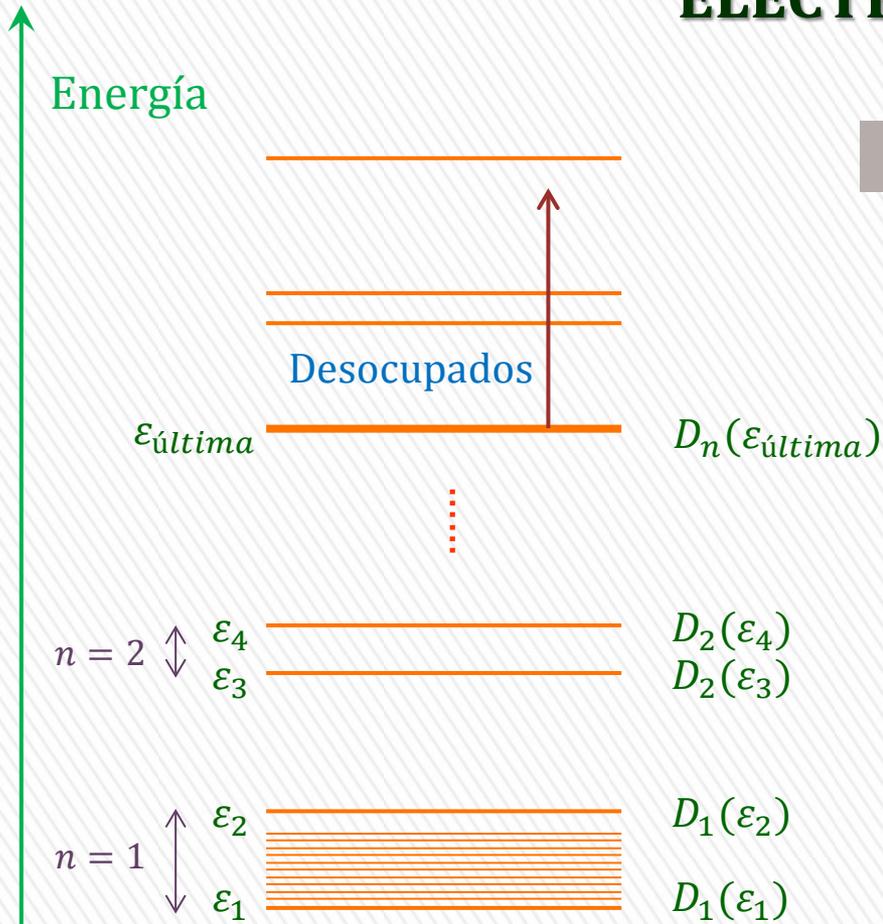
$$D_n(\varepsilon) = \frac{V}{4\pi^3} \int_{S_n(\varepsilon)} \frac{dS}{|\vec{\nabla}_{\vec{k}} \varepsilon_n(\vec{k})|}$$

DENSIDAD DE ESTADOS

Cobre



ESTADO FUNDAMENTAL DEL GAS DE ELECTRONES



DOS POSIBILIDADES

- ✓ Todas las bandas por debajo de una dada están ocupadas, y todas las demás desocupadas

AISLANTE

GAP: Diferencia de energía entre la del último nivel ocupado y la del primero desocupado

- ✓ La última banda está parcialmente ocupada

METAL

ENERGÍA DE FERMI: Energía del último nivel ocupado por electrones

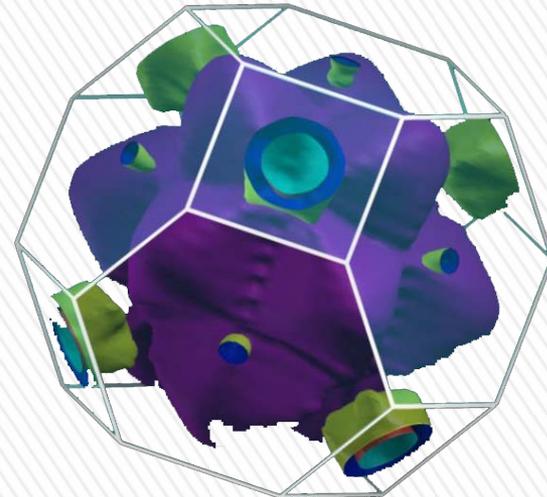
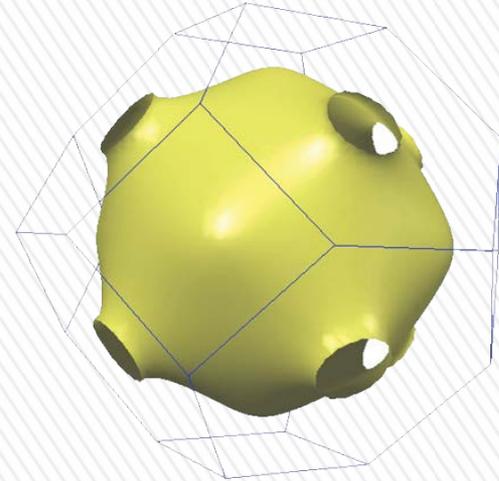
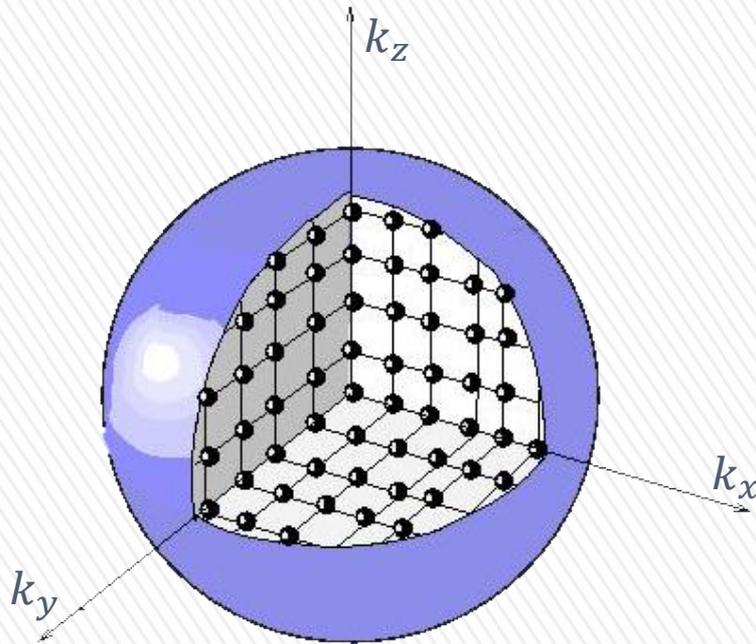
$$N_e = \sum_n \int_{\epsilon_{\min,n}}^{\epsilon_{\max,n}} D_n(\epsilon) d\epsilon$$

$$E_0 = \sum_n \int_{\epsilon_{\min,n}}^{\epsilon_{\max,n}} \epsilon D_n(\epsilon) d\epsilon$$

ESTADO FUNDAMENTAL DEL GAS DE ELECTRONES

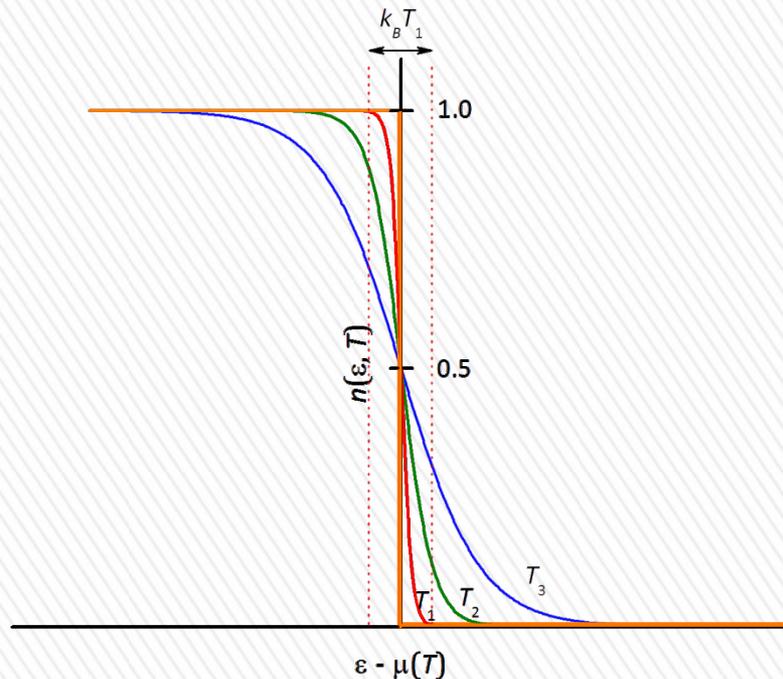
SUPERFICIE DE FERMI

Superficie del espacio recíproco que separa los estados ocupados de los desocupados



TEMPERATURAS FINITAS

Al aumentar la temperatura, algunos electrones pueden promocionar a niveles de energía mayores que la energía de Fermi.



$$n(\varepsilon, T) = \frac{1}{e^{[\varepsilon - \mu(T)]/k_B T} + 1}$$

Distribución de Fermi - Dirac

$$N_e = \sum_n \int_{\varepsilon_{\min, n}}^{\varepsilon_{\max, n}} n(\varepsilon, T) D_n(\varepsilon) d\varepsilon$$

$$E(T) = \sum_n \int_{\varepsilon_{\min, n}}^{\varepsilon_{\max, n}} \varepsilon n(\varepsilon, T) D_n(\varepsilon) d\varepsilon$$

ELECTRONES LIBRES (RED VACÍA)

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m_e} (\vec{k} + \vec{G})^2 - \varepsilon \right] c(\vec{k} + \vec{G}) + \sum_{\vec{G}'} U(\vec{G} - \vec{G}') c(\vec{k} + \vec{G}') = 0$$

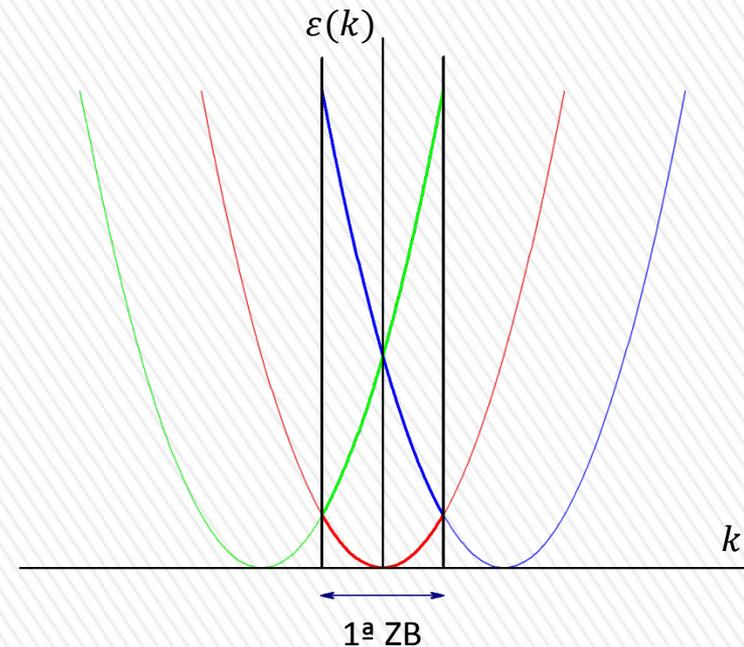
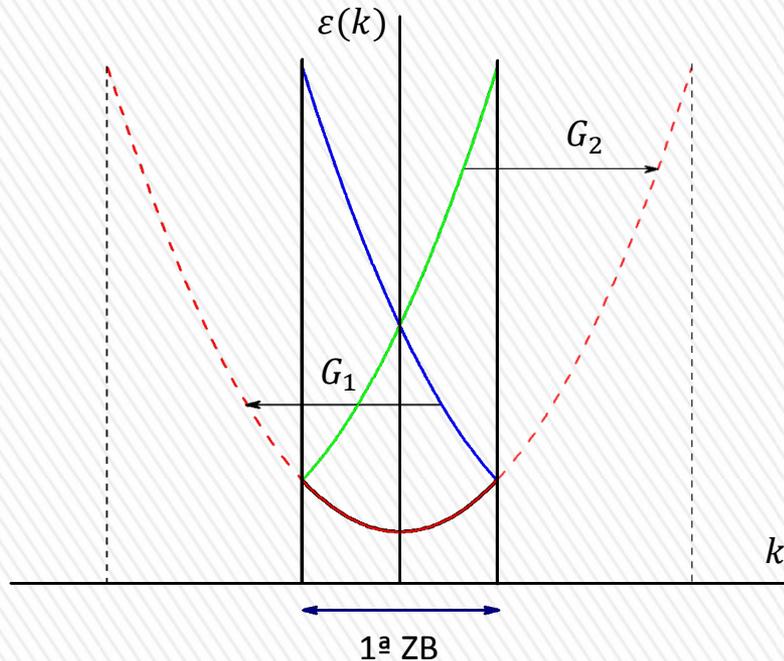
MODELO DE ELECTRONES LIBRES

$$U(\vec{r}) = U_0$$

$$U(\vec{G}) = \begin{cases} U_0 & \vec{G} = \vec{0} \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases}$$

$$\left[U_0 + \frac{\hbar^2}{2m_e} (\vec{k} + \vec{G})^2 - \varepsilon \right] c(\vec{k} + \vec{G}) = 0$$

$$\varepsilon(\vec{k}) = U_0 + \frac{\hbar^2 (\vec{k} + \vec{G})^2}{2m_e}$$



ELECTRONES LIBRES (RED VACÍA)

FUNCIONES DE ONDA

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \quad (\text{normalizadas})$$

$$-i\hbar\vec{\nabla}\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \hbar\vec{k}\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$$

$\hbar\vec{k}$ sí es el momento de los electrones libres

SUPERFICIE DE FERMÍ

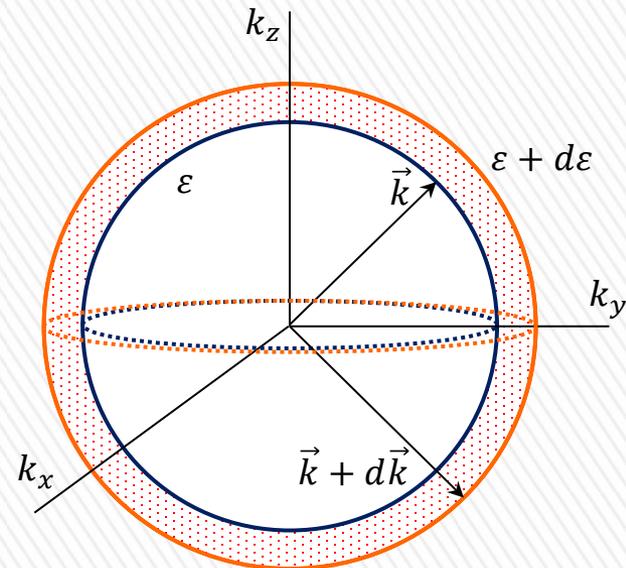
Las energías monoeléctricas dependen del módulo del vector de onda

ESFERA DE FERMÍ

$$k_F = \left(3\pi^2 \frac{N_e}{V}\right)^{1/3}$$

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m_e} (3\pi^2 n_e)^{2/3}$$

DENSIDAD DE ESTADOS

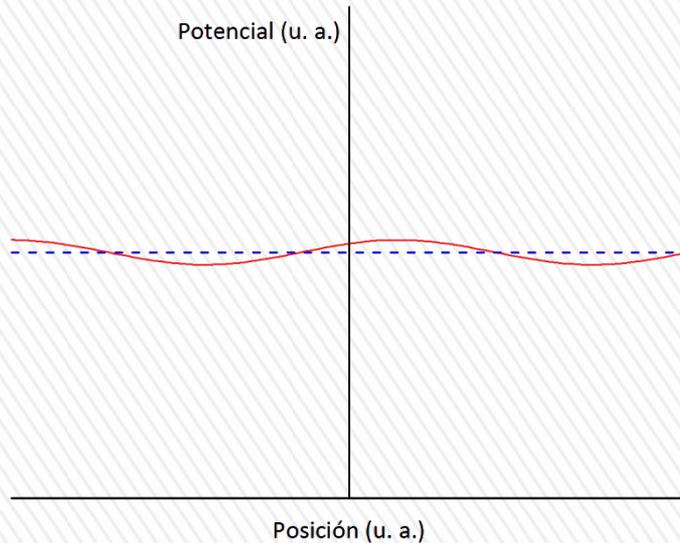


$$D(\varepsilon)d\varepsilon = D(\vec{k})dV^* = \frac{V}{4\pi^3} 4\pi k^2 dk$$

$$D(\varepsilon) = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m_e}{\hbar^2}\right)^{3/2} \varepsilon^{1/2}$$

ELECTRONES CUASI-LIBRES

Electrones sometidos a un potencial periódico pero **débil**



$$|U(\vec{G})| \ll U(\vec{0}) \quad \forall \vec{G}$$

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} [c(\vec{k} + \vec{G}) e^{i\vec{G} \cdot \vec{r}}] e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$$

$$\text{¿¿¿ } |c(\vec{k} + \vec{G})| \ll c(\vec{k}) \quad \forall \vec{G} \neq \vec{0} \quad ???$$

Ecuación central con $\vec{G} \neq \vec{0}$

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m_e} (\vec{k} + \vec{G})^2 - \varepsilon(\vec{k}) \right] c(\vec{k} + \vec{G}) + U(\vec{0})c(\vec{k} + \vec{G}) + U(\vec{G})c(\vec{k}) \approx 0 \quad \forall \vec{G} \neq \vec{0}$$

$$\frac{c(\vec{k} + \vec{G})}{c(\vec{k})} \approx \frac{U(\vec{G})}{\varepsilon(\vec{k}) - U(\vec{0}) - \frac{\hbar^2}{2m_e} (\vec{k} + \vec{G})^2} \quad \forall \vec{G} \neq \vec{0}$$

Ecuación central con $\vec{G} = \vec{0}$

$$\left[\frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m_e} - \varepsilon(\vec{k}) \right] c(\vec{k}) + U(\vec{0})c(\vec{k}) \approx 0 \quad \vec{G} = \vec{0}$$

$$\varepsilon(\vec{k}) = U(\vec{0}) + \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m_e}$$

$$\frac{c(\vec{k} + \vec{G})}{c(\vec{k})} \approx -\frac{m_e}{\hbar^2} \frac{U(\vec{G})}{\frac{1}{2} \vec{G}^2 + \vec{k} \cdot \vec{G}} \ll 1 \quad \forall \vec{G} \neq \vec{0}$$

ELECTRONES CUASI-LIBRES

Los electrones cuasi-libres se comportan como libres **salvo cuando** $\frac{1}{2}\vec{G}^2 + \vec{k} \cdot \vec{G} \approx 0$

$$\frac{c(\vec{k} + \vec{G})}{c(\vec{k})} \approx -\frac{m_e}{\hbar^2} \frac{U(\vec{G})}{\frac{1}{2}\vec{G}^2 + \vec{k} \cdot \vec{G}} \ll 1 \quad \forall \vec{G} \neq \vec{0}$$

Contorno de la primera zona de Brillouin

En el contorno de ZB, $c(\vec{k})$ y $c(\vec{k} + \vec{G})$ son comparables

$$\left[\frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m_e} - \varepsilon(\vec{k}) \right] c(\vec{k}) + U(\vec{0})c(\vec{k}) + U(-\vec{G})c(\vec{k} + \vec{G}) = 0$$

$$\left[\frac{\hbar^2 (\vec{k} + \vec{G})^2}{2m_e} - \varepsilon(\vec{k}) \right] c(\vec{k} + \vec{G}) + U(\vec{G})c(\vec{k}) + U(\vec{0})c(\vec{k} + \vec{G}) = 0$$

$$[\varepsilon_0(\vec{k}) - \varepsilon(\vec{k})]c(\vec{k}) + U(-\vec{G})c(\vec{k} + \vec{G}) = 0$$

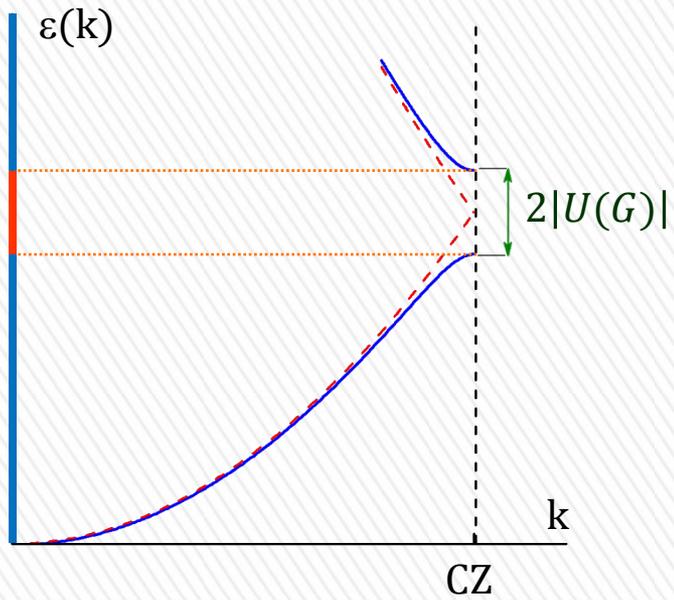
$$U(\vec{G})c(\vec{k}) + [\varepsilon_0(\vec{k} + \vec{G}) - \varepsilon(\vec{k})]c(\vec{k} + \vec{G}) = 0$$

$$\varepsilon_0(\vec{v}) = U(\vec{0}) + \frac{\hbar^2 \vec{v}^2}{2m_e}$$

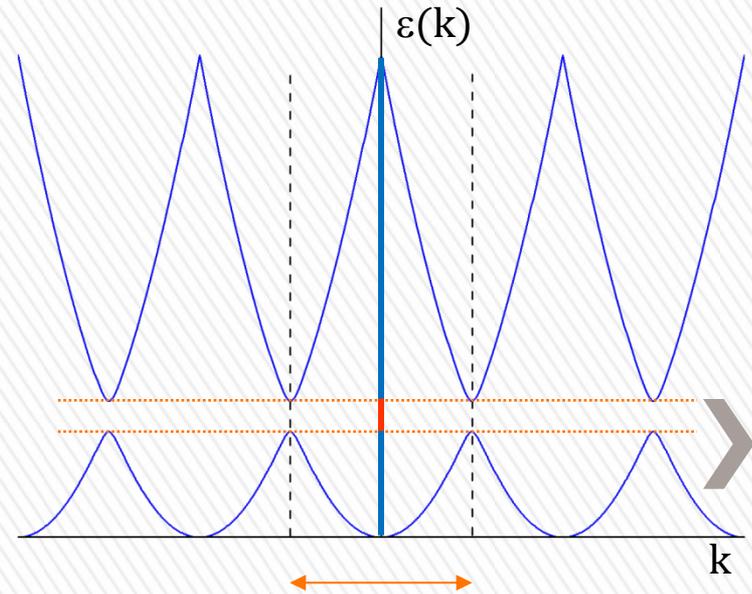
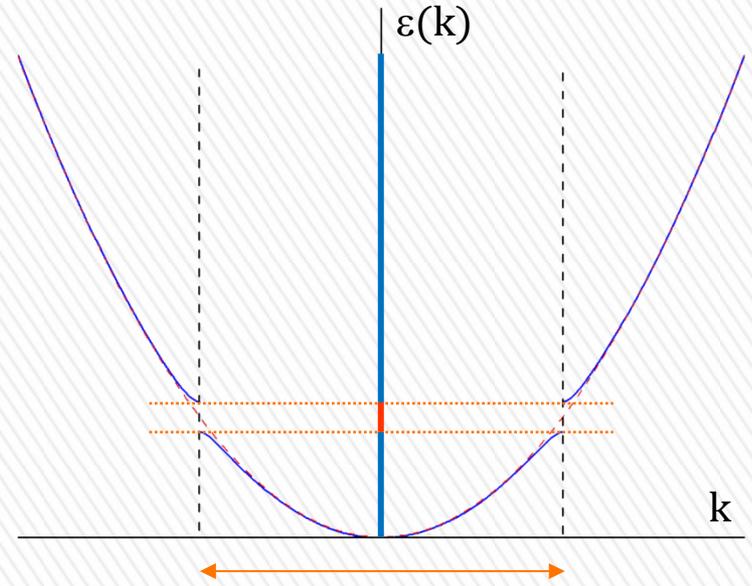
$$\varepsilon(\vec{k}) = \frac{\varepsilon_0(\vec{k}) + \varepsilon_0(\vec{k} + \vec{G})}{2} \pm \left[\left(\frac{\varepsilon_0(\vec{k}) - \varepsilon_0(\vec{k} + \vec{G})}{2} \right)^2 + |U(\vec{G})|^2 \right]^{1/2}$$

Relación de dispersión para electrones cuasi-libres

ELECTRONES CUASI-LIBRES



$$\epsilon(\vec{k})_{CZ} = \epsilon_0(\vec{k}) \pm |U(\vec{G})|$$



MASA EFECTIVA

Aceleración de un electrón Bloch

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

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

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

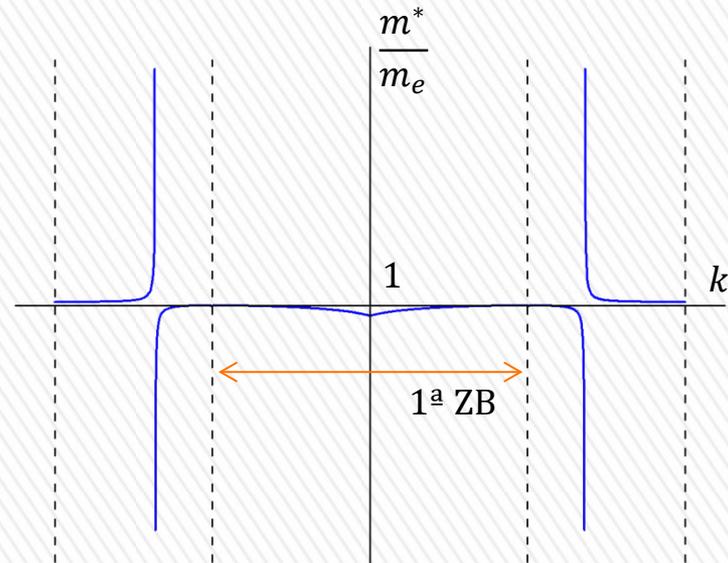
$$(m^*)_{ij}^{-1}(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \varepsilon(\vec{k})}{\partial k_i \partial k_j}$$

Tensor masa efectiva

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

En el entorno del extremo de una banda:

$$\begin{aligned} \varepsilon(\vec{k}) &\approx \varepsilon(\vec{k}_0) + \frac{1}{2} \sum_{ij} \left(\frac{\partial^2 \varepsilon(\vec{k})}{\partial k_i \partial k_j} \right) \Big|_{\vec{k}_0} (k_i - k_{0i})(k_j - k_{0j}) = \\ &= \varepsilon(\vec{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2} \sum_{ij} (m^*)_{ij}^{-1} \Big|_{\vec{k}_0} (k_i - k_{0i})(k_j - k_{0j}) = \\ &= \varepsilon(\vec{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{(k_x - k_{0x})^2}{m_{xx}^*} + \frac{(k_y - k_{0y})^2}{m_{yy}^*} + \frac{(k_z - k_{0z})^2}{m_{zz}^*} \right] \end{aligned}$$



HUECOS ELECTRÓNICOS

Una banda completamente llena es **inerte**

$$\int_{\text{Banda}} \frac{1}{4\pi^3} \vec{v}(\vec{k}) d\vec{k} = \vec{0}$$

Para una banda parcialmente llena:

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

$$\begin{aligned} \vec{j} &= \frac{-e}{4\pi^3} \int_{\text{ocupados}} \vec{v}(\vec{k}) d\vec{k} = \\ &= \frac{+e}{4\pi^3} \int_{\text{no ocupados}} \vec{v}(\vec{k}) d\vec{k} = \end{aligned}$$

Una banda parcialmente llena se comporta como si los niveles vacíos estuvieran ocupados por partículas de carga positiva



HUECO ELECTRÓNICO

Propiedades físicas del hueco

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

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

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

$$m_h^*(\vec{k}_h) = -m_e^*(\vec{k}_e)$$