

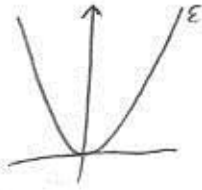
MODELO SEMICLÁSICO DE LA

CONDUCCIÓN

(el capítulo 12 tiene más info)

fig. 214-229

Estamos en disposición de mejorar el modelo de Drude-Sommerfeld, a tal que:

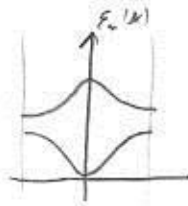


$$\epsilon(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$\psi(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \rightarrow \text{teniendo momento } \vec{p} = \hbar \vec{k}$$

Sabemos que

$\epsilon_n(\vec{k})$ no es trivial



$$\psi_{n\vec{k}} = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} u_n(\vec{r}), \text{ con } u_n(\vec{r} + \vec{R}) = u_n(\vec{r})$$

→ que sabemos de la serie de Fourier, (\vec{r} no, \vec{r} a lo.)
definito o periódico

¿Cómo se comporta un e^- entre colisiones cuando tenemos en cuenta la dispersión?

(En Drude se sabe según experimentos ⇒ donde designa σ , el coeficiente Hall...)

Sabemos que si está en un estado estacionario, se mueve con una velocidad promedio

$$\vec{v}_n = \left\langle \frac{\vec{p}_n}{m} \right\rangle = \frac{1}{\hbar} \vec{\nabla}_{\vec{k}} \epsilon_n(\vec{k}) \Rightarrow \text{Dado que } \epsilon \text{ es que } \text{los } e^- \text{ apenas chocan: los que } \underline{NO} \text{ chocan a los } e^- \text{ (son estados estacionarios, no chocan)}$$

hacis: bandas llenas no conducen

La conductividad no vale $\vec{j} = -en\vec{v}$, pues cada e^- tiene una velocidad radicalmente diferente
de e^- con momento entre \vec{k} y $\vec{k} + d\vec{k}$ = $(2\pi)^{-3} d^3k \cdot \frac{1}{v}$
por nivel de energía
→ cantidad de e^- tiene

$$d\vec{j} = -e \left(\frac{dn(\vec{k})}{d^3k} \right) \vec{v}(\vec{k})$$

$$d\vec{j} = -\frac{2e}{(2\pi)^3} d^3k \vec{v}(\vec{k})$$

La corriente total asociada a todas las bandas es:
↳ pero no la banda está llena

$$\vec{j} = -\frac{2e}{(2\pi)^3} \int \frac{1}{\hbar} \vec{\nabla}_{\vec{k}} \epsilon_n(\vec{k}) d^3k$$

Vamos a ver que esto es 0. Es más cómodo expresar haciendo la cuenta en 1D:

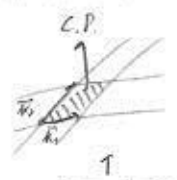
$$j = -\frac{2e}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dk \frac{1}{\hbar} \frac{d\epsilon}{dk} = -\frac{e}{\pi\hbar} [\epsilon(k)]_{k=-\pi/a}^{k=\pi/a}$$

ϵ tiene periodicidad $2\pi/a$
 $\stackrel{!}{=} 0$

3D. El producto a veces no atorga el sentido: (donde $x_i \rightarrow$ los x y $k_i \rightarrow$ los k)

$$\frac{\partial}{\partial x_i} = \sum_j \frac{\partial k_j}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial k_j}$$

Como ∇ es un vector, los componentes no atorgados van a ser C.L. de $\frac{\partial}{\partial k_j}$



$$\vec{j} = \sum_i c_i \int_{C.P.} dk_1 dk_2 dk_3 \frac{\partial \epsilon}{\partial k_i}$$

La integral en k_i es la definición de ϵ en los puntos del espacio de los \vec{k} que define por $\vec{k} \in R.R.$ (es la frontera de C.P.)

\Downarrow
 Cada integral es nula $\Rightarrow \vec{j} = 0$

Notar que para estudio dinámico no podemos usar ondas de Bloch (totalmente deslocalizadas)

sino que deberemos usar paquetes de onda \Rightarrow modelos semiclásicos

Preparamos un paquete de ondas centrado en k_0 y de anchura $\Delta k \ll \frac{2\pi}{a}$ (para que individualmente tengan sentido momento (velocidad))

Como por el p.p.o. de incertidumbre $\Delta k \Delta x > 2\pi \Rightarrow \Delta x \gg a$ (no puede haber un ψ en un solo sitio ϵ , o que no necesariamente es parámetro)

Las ecuaciones de evolución las da el teorema de Ehrenfest:

$$\begin{cases} \dot{\vec{r}} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} \epsilon(\vec{k}) \\ \hbar \dot{\vec{k}} = \vec{F}_{ext} \end{cases}$$

(donde \vec{r} y \vec{k} son valores promedio)

\Rightarrow Por lo tanto $\hbar \dot{\vec{k}}$ NO es el \vec{F} (es $\vec{F}_{ext} + \vec{F}_{int}$)

aunque en realidad no es directamente por Ehrenfest: las deducciones que hay son muy complejas y con muchas hipótesis. Más bien son resultados esperables.

E_{1D} :

$$\dot{x} = \frac{1}{\hbar} \frac{d\varepsilon}{dk} \Rightarrow \ddot{x} = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2\varepsilon}{dk^2} \dot{k} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2\varepsilon}{dk^2} F_{ext}$$

$$\hbar \dot{k} = F_{ext}$$

\Downarrow

$$\ddot{x} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2\varepsilon}{dk^2} F_{ext} \Rightarrow \text{es como si los } e^- \text{ tuvieran una masa efectiva}$$

$$m^* = \left(\frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2\varepsilon}{dk^2} \right)^{-1} \Rightarrow \text{Cuanto más plana sea la curva, mayor es la masa efectiva}$$

Veros que $m^* = m^*(k) \Rightarrow$ Debido a la interacción con los iones, la inercia del e^- varía

Además, si no hay fuerza externa, $k=0$ y la velocidad de los e^- no varía

La generalización a 3D es inmediata:

$$\dot{x}_i = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_n}{\partial k_i} \Rightarrow \ddot{x}_i = \sum_j \frac{1}{\hbar} \frac{\partial^2 \varepsilon_n}{\partial k_i \partial k_j} \dot{k}_j \quad (\text{suma de los vecinos})$$

$$\text{Y con } \hbar \dot{k}_i = F_i^{ext} \Rightarrow \ddot{x}_i = \frac{1}{\hbar^2} \sum_j \frac{\partial^2 \varepsilon_n}{\partial k_i \partial k_j} F_j^{ext}$$

existe una relación lineal entre la aceleración y la fuerza, respinti, a general, en tensor.

(Igual que $\vec{L} = I\vec{\omega}$)

Se define así el tensor de masa efectiva:

\Downarrow
LA INERCIA DE UN e^-
ES ANISÓTROPA (por eso la red es rígida)

$$(M^{-1})_{ij} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \varepsilon_n}{\partial k_i \partial k_j}$$

Al ser una matriz simétrica, en cada punto del espacio recíproco es diagonalizable respinti

unos ejes principales ortogonales:

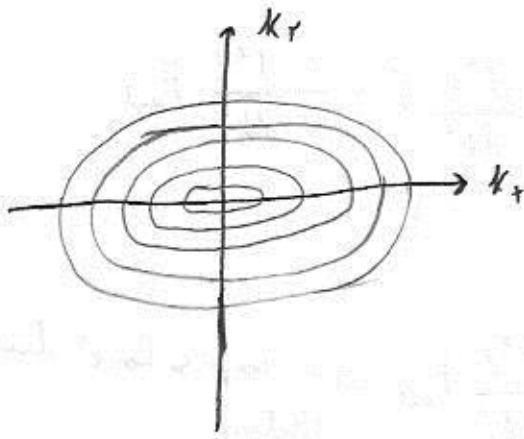
$$F_1^{ext} = m_1 a_1$$

$$F_2^{ext} = m_2 a_2$$

$$F_3^{ext} = m_3 a_3$$

P.ej., en 2D:

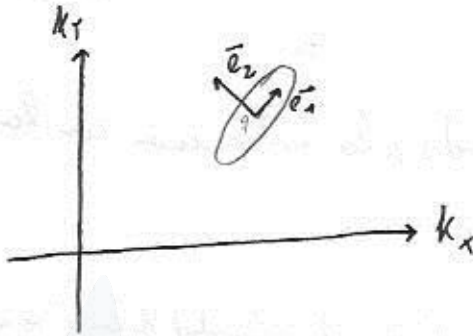
(líneas de nivel
de igual energía)



• Por cierto, los ejes ppales son X e Y
($k_x > k_y$ ppal, k_y tal vez!)

• Las curvaturas en dirección X es menor,
 $m_x > m_y$

Otro ejemplo:



En el punto q, los ejes ppales son \vec{e}_1 y \vec{e}_2 ,
con $m_1 > m_2$

• En general, en el entorno de máximos/mínimos, las superficies de igual energía son elipsoides (para

$\mathcal{E} \approx \mathcal{E}_q + \frac{1}{2} \sum_k k_n \frac{\partial^2 \mathcal{E}}{\partial k_n \partial k_n} k_n$). En los casos a los que M es diagonal: ($\Rightarrow M^{-1}$ diagonal)

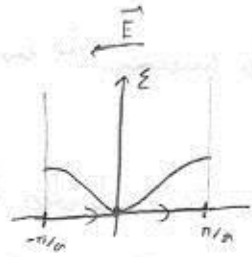
$$\frac{\hbar^2 k_1^2}{2m_1} + \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m_2} + \frac{\hbar^2 k_3^2}{2m_3} = \mathcal{E}$$

un elipsoide cuyos ejes son los ejes ppales: y cuyas anchuras son $\propto \sqrt{m_i}$ (o sus anchuras, sus anchos efectivos)

• Veamos como más raras: un e^- en 1D bajo un campo eléctrico externo

$$\dot{x} = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk}$$

$$\hbar \dot{k} = -eE \Rightarrow k(t) = k(0) - eEt$$



El e^- se mueve de izquierda a derecha en
 nitros de E a lo largo de los k

$$\cos v = \frac{dE}{dk}, \quad \downarrow$$

¡ El e^- bajo un campo eléctrico externo de onda!

• El problema es que se ignoró las colisiones, ^{con fonones y defectos} que terralizan y hacen que el ciclo
 $L_T \sim 10^{-14}$ s

vuelven a empezar.

(y los conseguimos observar a nitros de luz)

• Nótese que, al ser $m^* = \left(\frac{1}{\hbar} \frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \right)^{-1}$, en las regiones conexas $m^* < 0 \Rightarrow$ por eso el e^- se da

la vuelta.

↓
 Estrictamente, los ondas de Bragg se reflejan e interfieren constructivamente
 hacia atrás \Rightarrow lo son hacia que el e^- tiene colisiones hacia atrás \Rightarrow origina estas fuerzas,
 el e^- se fuerza a ignorar los iones, nada teoría efectiva.

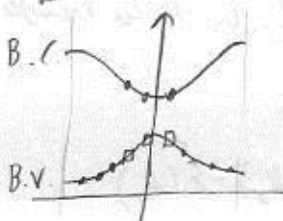
• Hay una forma de arreglar la masa negativa:

$$a = \frac{F}{m^*} = \frac{-eE}{m^*} = \frac{+eE}{-m^*}$$

¡ es como si tengo una partícula con masa positiva pero carga positiva!

$$\frac{1}{m^*} = - \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k^2}$$

• Considera qué ocurre en un semiconductor:



La dinámica de las ausencias de e^- es la misma que la de los e^- :
 si aplico \vec{E} , los e^- se van a mover en el espacio recíproco a cierta
 velocidad (cte.) \Rightarrow los huecos que hay entre ellos también se van
a mover: ni se crean ni destruyen huecos.

Por tanto, en el espacio real la dirección de un hueco es la misma que la de e^- .

Como la ausencia de e^- , es natural asignarle carga positiva y masa efectiva $\frac{1}{m^*} = -\frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \epsilon}{\partial k^2}$

Como en un semiconductor los huecos están en las partes superiores de B.V. y los e^- en las partes inferiores de B.C., siempre van a tener masa positiva.

Veamos esto en serio:

$$\vec{j} = -2e \int_{\text{todas ocupadas}} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} \epsilon$$

ahora, $\int_{\text{todas ocupadas}} = \int_{\text{banda}} - \int_{\text{huecos}}$

$$\vec{j} = 2e \int_{\text{huecos}} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} \epsilon$$

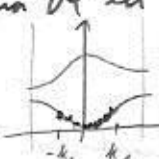
es decir, la corriente transportada por unos e^- de carga negativa es la misma que la que transportarían unos huecos de carga positiva.

Acabamos de ver que podemos obviar los e^- y suponer que son los huecos los que conducen.

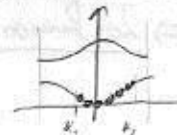
(La realidad la corriente la lleva los e^- , pero el resultado final es EL MISMO. son dos formas de hacer el mismo cálculo. Si una banda fuese hueca)

Intuitivamente, ya sabemos que e^- y huecos tienen la misma dirección. (en semiconductores, solo unos e^- para B.C. y huecos para B.V. son iguales de importancia).
 Ojo, se trata de una descripción a otro, no ambos a la vez.

Vamos a fijar alguna idea sobre la dirección de la conducción.

Si tengo una banda sencilla  , $\int_{-k_1}^{k_1} = 0 \Rightarrow$ equilibrio $\vec{j} = 0$, es a lo que

Al aplicar \vec{E} , como $\hbar k = -e E$, los e^- se moverán dentro de la banda y, debido a las colisiones, se alcanzará un régimen estacionario:

$$j = \int_{k_1}^{k_2} \propto \epsilon(k_2) - \epsilon(k_1)$$


es decir, \vec{E} induce una distribución que no es de equilibrio, y conduce.

• Si la banda está llena, NO hay distribuciones de no equilibrio porque como, solo hay una posible distribución por estar la banda llena \Rightarrow no conduce.

• Recuerda que en términos de bandas, $\sigma \neq \frac{ne^2\tau}{m}$. La deducción no es difícil, se llega a (13.27).

(Solo hace EXACTAMENTE igual que cuando $F: \vec{p} \rightarrow \dots$)

$$\sigma_{ij} = 2e^2\tau \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} [M^{-1}_{ij}(\vec{k})]$$

Aistrop
por subbandas



Zimatek