Estructura de la Materia 2 Guía 5: Dinámica de electrones de Bloch

1. Para una red cuadrada de parámetro a considere una banda de energía dada por:

$$\epsilon(\vec{k}) = \epsilon_0 - 2t[\cos(k_x a) + \cos(k_y a)]$$

- a) Grafique la velocidad de un electrón en esta banda en dirección $\vec{k}=(k_x,0)$.
- b) Si el electrón se encuentra en un estado \vec{k} y no hay campos externos aplicados, ¿cómo se mueve el electrón en el espacio real? Justifique su respuesta.
- c) Si tenemos un campo eléctrico $\vec{E} = (0, E_y)$, ¿cómo evoluciona \vec{k} en función del tiempo? Haga un gráfico cualitativo de la trayectoria del electrón en el espacio real.
- d) Calcule el tensor de masa efectiva.
- e) En esta banda, ¿la aceleración del electrón es paralela al \vec{E} aplicado? Justifique.
- 2. (a) Teniendo en cuenta que el campo de relajación del cobre es aproximadamente 20×10^{-14} s, cuán intenso debe ser un campo eléctrico para tener una oscilación de Bloch en un tiempo menor que el tiempo de relajación?
 - (b) Considere el sistema GaAs, donde a bajas temperaturas los tiempos de relajación pueden llegar a 3×10^{-10} s y es posible construir estructuras artificiales con celdas unidad del orden de 100 Å. En este caso, cuánto debe valer la intensidad del campo eléctrico para ver las oscilaciones de Bloch?
- 3. (a) Partiendo de la ecuación de Boltzmann en la aproximación de tiempo de relajación, muestre que la conductividad σ_{ij} (que da la corriente inducida por un campo eléctrico externo: $j_i = \sigma_{ij} E_j$; suma sobre j) está dada por:

$$\sigma_{ij} = e^2 \int \frac{d\vec{k}}{4\pi^3} \tau(\vec{k}) v_i(\vec{k}) v_j(\vec{k}) \left(-\frac{\partial f}{\partial \epsilon} \right) \Big|_{\epsilon(\vec{k})}$$
(1)

- (b) Exprese σ_{ij} en términos del tensor de masa efectiva.
- (c) Demuestre que para electrones libres se recupera la fórmula de Drude (NOTA: recuerde que esto es una *casualidad*, porque la física involucrada en la deducción de esta formula es incorrecta).

- 4. Demostrar que para un cristal tetragonal la conductividad es isotrópica en el plano perpendicular al eje c. Para ello, utilice las simetrías del cristal y el hecho de que la corriente y el campo eléctrico son vectores.
- 5. Considere un metal bidimensional con una red de Bravais cuadrada de constante de red a. La banda de conducción está dada en la aproximación de enlaces fuertes por:

$$E = E_0 + E_1(2 - \cos(k_x a) - \cos(k_y a)) \tag{2}$$

y el tiempo de relajación τ es independiente de \vec{k} . La banda está semillena.

- (a) Calcule el tensor de conductividad (parametrice la línea de Fermi, use el hecho de que la banda está semillena y la simetría del cristal).
- (b) Compare el resultado de (a) con la conductividad que obtiene mediante la fórmula de Drude. Para esto, use la misma densidad de electrones y el mismo tiempo de relajación. Encuentre la masa efectiva del modelo de Drude y la del modelo de enlaces fuertes y muestre que discrepan.
- (c) (Opcional) Calcule numéricamente la conductividad en función de la densidad de electrones, y muestre que la fórmula de Drude sólo es válida para una banda casi vacía o casi llena (explique por qué sucede esto).