

Estructura de la Materia 2

Primer Cuatrimestre - 2020

Guía 6 - Parte I

En esta clase vamos a obtener información relevante para predecir propiedades de un material, a partir de una estructura de bandas calculada.

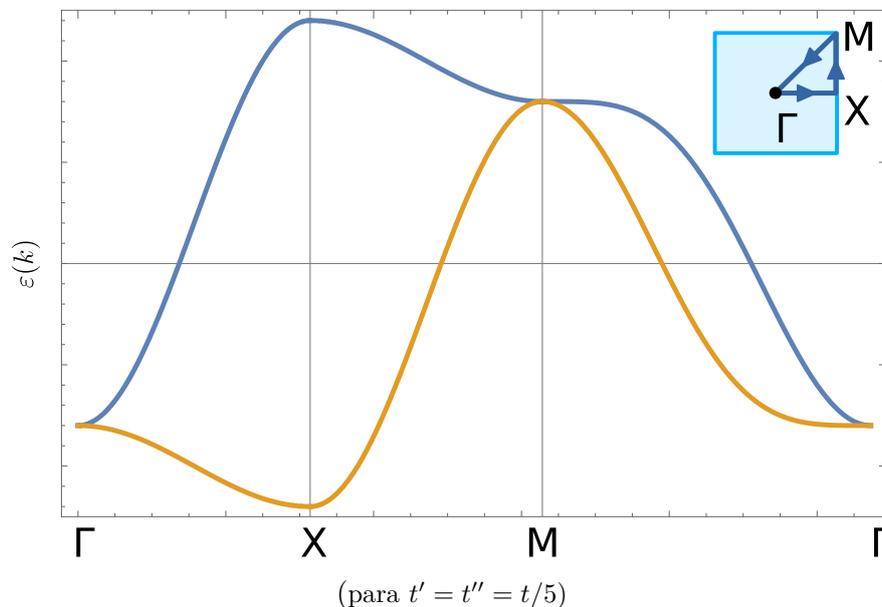
Tomaremos como primer ejemplo la red 2D que resolvió Tomás en su clase. En este ejemplo, teníamos una red cuadrada monoatómica, donde cada sitio aportaba dos orbitales tipo p (uno p_x y otro p_y), cuya estructura de bandas se obtuvo por el método de uniones fuertes (*tight binding*). Las dos bandas obtenidas al deslocalizar los dos orbitales por sitio dan un espectro

$$\epsilon_{1,2}(\mathbf{k}) = -(t - t')[\cos(k_x a) + \cos(k_y a)] \pm \Delta(\mathbf{k}), \quad (1)$$

donde

$$\Delta(\mathbf{k}) = \sqrt{(t + t')^2[\cos(k_x a) - \cos(k_y a)]^2 + [4t'' \sin(k_x a) \sin(k_y a)]^2}. \quad (2)$$

Partiendo del supuesto $t > t' \simeq t''$, podíamos graficar la siguiente estructura de bandas en el camino $\Gamma \rightarrow X \rightarrow M \rightarrow \Gamma$ [$\Gamma = (00)$, $X = (\frac{1}{2}0)$, $M = (\frac{1}{2}\frac{1}{2})$, donde $(hl) \equiv (2\pi h/a, 2\pi l/a)$]:



Superficie de Fermi

Si bien este cálculo es trivial (en una computadora) una vez conocidas las bandas, haremos una estimación del mismo para aprender a leer una estructura de bandas y extraer información cualitativa relevante.

El caso de una sola banda

Puede resultar más intuitivo comenzar por analizar qué pasaría si solamente estuviera la banda ϵ_2 , ya que su pronunciado mínimo en el punto Γ la hace más parecida a la energía de un electrón libre. Dado que estamos considerando una sola banda, solo tiene sentido preguntarse por el nivel de Fermi para un electrón por sitio, ya que **dos electrones por sitio ocuparían la banda completa**.

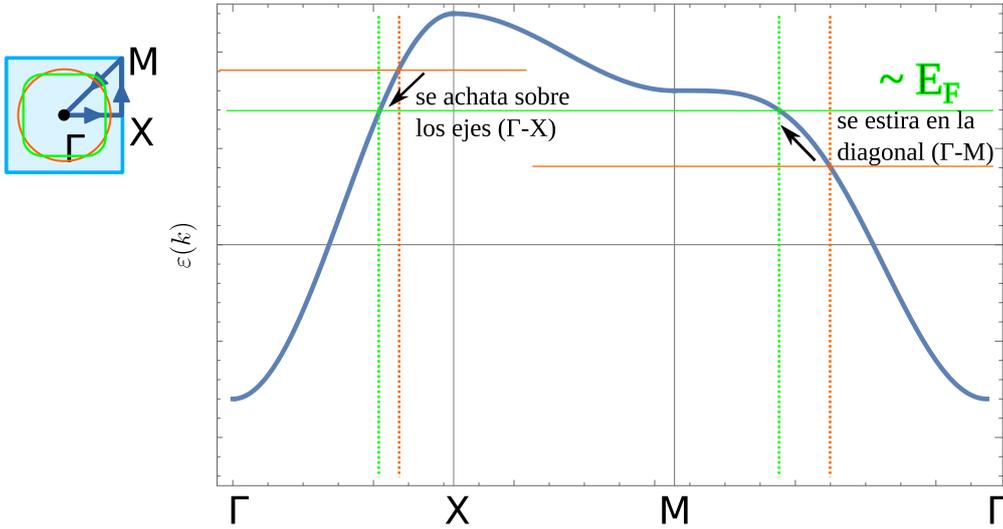
Ignorando por completo la banda ϵ_1 , comenzaríamos a ocupar los estados entorno al vector $\mathbf{k} = 0$. Si hacemos esto de manera isotrópica, como si fuera realmente una banda de energía de electrones libres, sabemos que en un radio k caben

$$2 \times \frac{\pi k^2}{(2\pi/a)^2} = \frac{a^2 k^2}{2\pi} \text{ electrones por sitio,} \quad (3)$$

donde usamos el hecho de que en el volumen (superficie, en 2D) de la 1ZB contiene exactamente un estado \mathbf{k} por sitio de la red de Bravais, duplicados por la degeneración de espín. De esta forma,

$$1 = \frac{a^2 k_F^2}{2\pi} \Rightarrow k_F = \frac{\sqrt{2\pi}}{a} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\pi}{a} \simeq 0,8 \frac{\pi}{a} \quad (4)$$

Si representamos la superficie $|\mathbf{k}| = k_F$ para este valor sobre la 1ZB (naranja), vemos que corta al camino $\Gamma \rightarrow X$ cerca del borde de la zona, mientras que el camino $M \rightarrow \Gamma$ lo corta aproximadamente al medio. Podemos entonces intentar ubicar el nivel de Fermi en nuestro diagrama de bandas (mirando solo la banda ϵ_2), pero encontraremos que las energías correspondientes a este k_F difieren entre ambos caminos. Es decir, no es una superficie de igual energía. Sin embargo, tampoco está tan lejos de serlo.



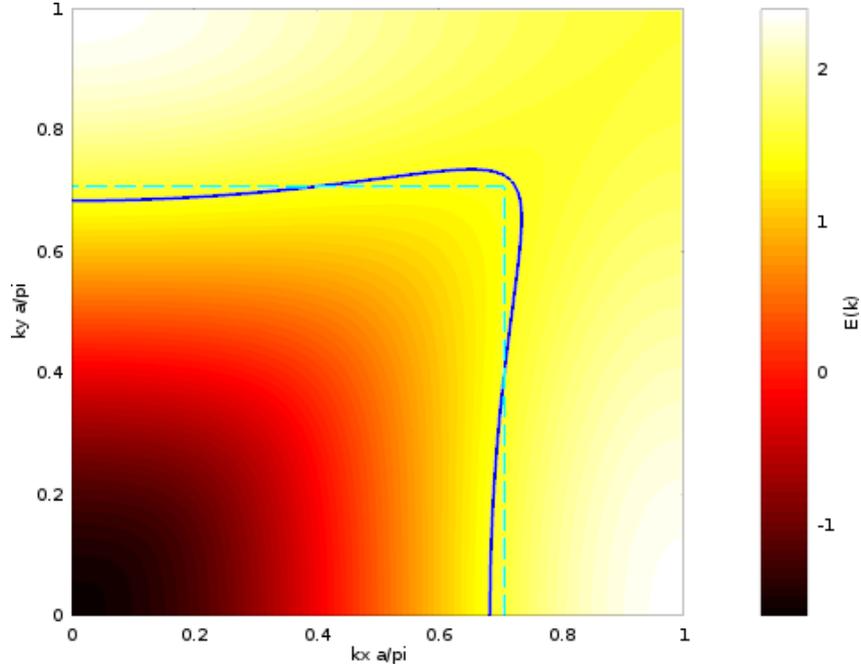
Proponiendo y trazando *algún* nivel de Fermi intermedio (verde), vemos que la intersección de esta energía constante con la banda se corre hacia el punto Γ en el tramo $\Gamma \rightarrow X$, es decir, se acerca al centro, mientras que en el tramo $M \rightarrow \Gamma$ se corre hacia M , alejándose del centro de la 1ZB. Cualitativamente, esto corresponde a una superficie de Fermi ligeramente distorsionada con respecto a la circunferencia original, achatada sobre los ejes y estirada en la diagonal, semejante a un cuadrado redondeado. Veamos qué pasa si proponemos una superficie de Fermi cuadrada, como una mejor aproximación. Podemos repetir el cálculo de los estados disponibles, pero esta vez para un sector cuadrado de la 1ZB dado por $k_x, k_y \leq \bar{k}$. Nos queda

$$2 \times \frac{(2\bar{k})^2}{(2\pi/a)^2} = \frac{2a^2 \bar{k}^2}{\pi^2} \text{ electrones por sitio,} \quad (5)$$

con lo cual, la superficie de Fermi correspondiente a un electrón por sitio se encuentra en $\bar{k} = \pi/(\sqrt{2}a) \simeq 0,71 \pi/a$. Si volvemos a la figura de la estructura de bandas, vemos que el punto $(\bar{k}, 0)$ se ubica en el camino $\Gamma \rightarrow X$ ligeramente a la izquierda del k_F anterior mientras que el punto (\bar{k}, \bar{k}) da un $|\mathbf{k}| = \pi/a$, que se ubicaría aproximadamente a un tercio del camino

$M \rightarrow \Gamma$, que es aproximadamente donde nos quedó trazada la intersección con la E_F estimada en un principio. Por lo tanto, esta solución resulta consistente.

En la siguiente figura les muestro las energías calculadas numéricamente para toda la banda, con la curva correspondiente a la superficie de Fermi *real* (azul, trazo continuo) y la aproximación por una superficie cuadrada (celeste, trazo cortado). Se ve que el resultado que obtuvimos simplemente observando la estructura de bandas, calculada a lo largo de los ejes de simetría, no difiere significativamente del que se obtiene numéricamente buscando las curvas de nivel de la solución completa.



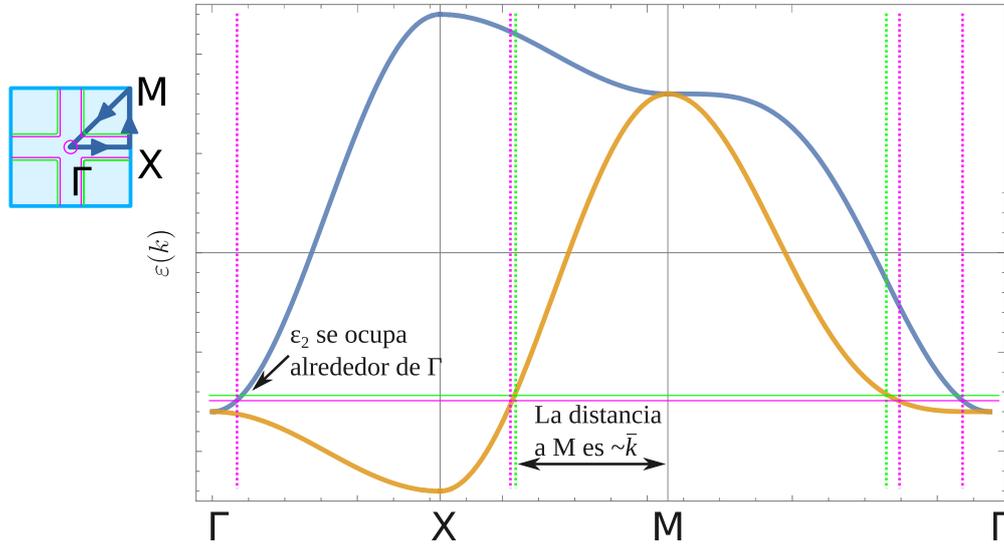
El caso de las dos bandas

Vamos a completar este ejemplo evaluando ahora el sistema completo, tomando en cuenta ambas bandas. Una advertencia: voy a usar muchos argumentos para ahorrar cuentas que tal vez no son aplicables a cualquier otro caso. No se desesperen por entender los detalles cuantitativos, no es lo importante en esta parte. Sí me interesa discutir algunos puntos cualitativos que voy a ir señalando en el camino.

Busquemos primero la superficie de Fermi para el caso en que tenemos, al igual que antes, **un solo electrón por sitio**. Necesitamos ocupar una cantidad de estados equivalentes a media banda en la 1ZB, pero, dado que las bandas se solapan en energía, hay que determinar como repartir la ocupación entre las dos bandas. Dado que el mínimo de la banda ϵ_1 es más bajo que el de la banda ϵ_2 , podemos empezar llenando esta banda y ver dónde quedaría el nivel de Fermi usando solo la banda ϵ_1 . En este punto me voy a ayudar de la simetría que presentan ambas bandas *en este caso*: si invertimos de signo la banda ϵ_1 e intercambiamos Γ por M , nos queda igual a la banda ϵ_2 . ¿Cómo aprovechar esto? La banda ϵ_2 se llenaba desde el punto Γ , de menor energía, hasta completar un área cuadrada igual a la mitad del área de la 1ZB. Como **una banda medio llena es también una banda medio vacía**, podemos usar el mismo argumento que antes para llegar a la conclusión que la banda ϵ_1 se va a *vaciar* desde el punto M hasta dejar solo media área de la 1ZB ocupada. Es decir, la superficie de Fermi separaría los estados con $(\pi/a - k_x), (\pi/a - k_y) \geq \bar{k}$.

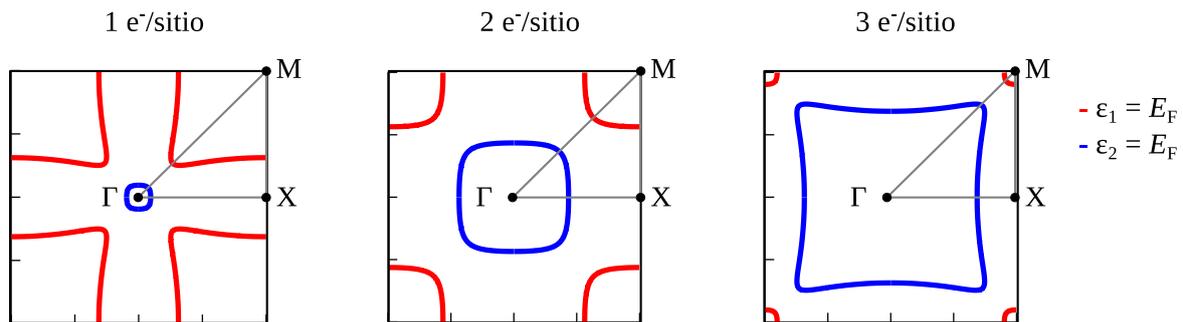
Si ubicamos aproximadamente los puntos $(\pi/a - \bar{k}, 0)$ sobre el camino $\Gamma \rightarrow X$ y $(\pi/a -$

$\bar{k}, \pi/a - \bar{k}$) sobre el camino $M \rightarrow \Gamma$ en el gráfico la estructura de bandas, vemos que nos dan una energía similar (verde), que es la reflexión de la energía de Fermi hallada antes para la banda ϵ_2 . También vemos que la banda ϵ_2 queda apenas por debajo dicha energía cerca del punto Γ . Por lo tanto, sabemos que algunos estados de ϵ_2 se ocuparán antes que se ϵ_1 se llene hasta tal nivel. El resultado será una energía de Fermi ligeramente más baja (magenta), ubicada en algún valor intermedio entre la que nos daría la banda ϵ_1 sola y el mínimo de ϵ_2 .



La nueva superficie de Fermi ahora se compone por las intersecciones de ambas bandas con el nivel de Fermi. Para la banda ϵ_1 , el conjunto de estados ocupados dibujan, aproximadamente, una cruz sobre los ejes x e y , correspondientes a¹ $|k_x|, |k_y| \lesssim \pi/a - \bar{k}$, mientras que para ϵ_2 los estados ocupados describen un pequeño círculo² centrado en Γ .

A continuación les dejen las superficies de Fermi calculadas para distintos números de electrones por sitio. Les propongo que, mediante argumentos similares a los que usamos para el caso de un electrón por sitio, intenten justificar la forma de las superficies de Fermi para los casos de dos y tres electrones por sitio.



¹Pongo un aproximadamente menor porque la superficie no es estrictamente recta y porque al descontar los estados que se liberan por la ocupación de ϵ_2 la parte ocupada de ϵ_1 se reduce ligeramente.

²Al haber unos pocos estados ocupados, podemos pensar que cerca del mínimo la banda ϵ_2 es aproximable por un Taylor a segundo orden, lo que da superficies de nivel circulares, dada la simetría entre x e y .

Dinámica de electrones

Vamos a resolver las consignas del **ejercicio 1** de la **guía 6**, pero aplicadas al sistema que venimos estudiando.

- a) Grafique la velocidad de un electrón en función del número de onda k para la dirección $\vec{k} = (k_x, 0)$.

Bajo el modelo semiclásico (Teórica 12), pensamos a *un* electrón como un paquete de ondas centrado en el estado $|n, \mathbf{k}\rangle$ ($n =$ índice de banda). Por lo tanto, cuando nos referimos a su velocidad, se trata de la *velocidad de grupo*

$$\dot{\mathbf{r}} = \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{d\epsilon_n}{d\mathbf{k}}. \quad (6)$$

En nuestro caso, esto nos da, para la componente x ,

$$\begin{aligned} \dot{x} &= \frac{1}{\hbar} \frac{d\epsilon_n}{dk_x} = \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dk_x} \left\{ -(t-t') [\cos(k_x a) + \cos(k_y a)] \pm \Delta(\mathbf{k}) \right\} \\ &= \frac{1}{\hbar} \left[(t-t') a \sin(k_x a) \pm \frac{1}{2\Delta} \frac{d\Delta^2}{dk_x} \right], \end{aligned} \quad (7)$$

siendo

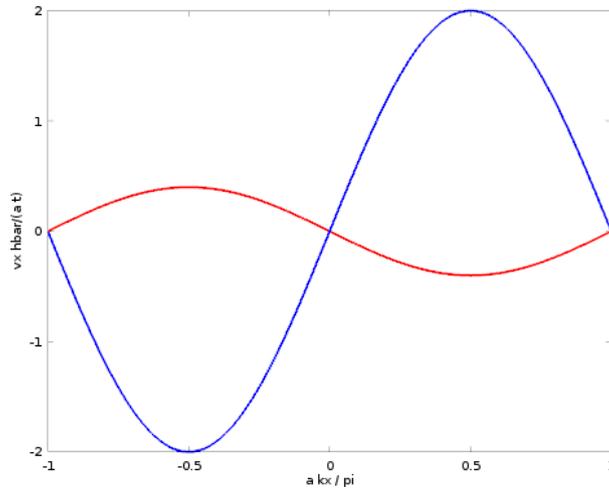
$$\begin{aligned} \frac{d\Delta^2}{dk_x} &= \frac{d}{dk_x} \left\{ (t+t')^2 [\cos(k_x a) - \cos(k_y a)]^2 + [4t'' \sin(k_x a) \sin(k_y a)]^2 \right\} \\ &= -2a \sin(k_x a) \left\{ (t+t')^2 [\cos(k_x a) - \cos(k_y a)] - (4t'')^2 \cos(k_x a) \sin^2(k_y a) \right\}. \end{aligned} \quad (8)$$

Para la componente y se llega a una expresión idéntica, intercambiando x por y . Ahora, particularizando en $k_y = 0$, como nos pide el ejercicio, nos quedan³

$$\begin{aligned} \dot{x} &= \frac{a}{\hbar} \sin(k_x a) \left\{ t-t' \pm \frac{-2(t+t')^2 [\cos(k_x a) - 1]}{2\sqrt{(t+t')^2 [\cos(k_x a) - 1]^2}} \right\} \\ &= \frac{a}{\hbar} \sin(k_x a) \left\{ t-t' \pm (t+t') \right\} = \begin{cases} -2 a t' \hbar^{-1} \sin(k_x a) & \text{para la banda } \epsilon_1 \\ +2 a t \hbar^{-1} \sin(k_x a) & \text{para la banda } \epsilon_2 \end{cases} \end{aligned} \quad (9)$$

$\dot{y} = 0$ para ambas bandas.

Si lo graficamos, nos queda:



³Cuidado con el signo! En el denominador $\sqrt{[\cos(k_x a) - 1]^2} = |\cos(k_x a) - 1| = -(\cos(k_x a) - 1)$ porque $\cos(k_x a) \leq 1$.

Se puede ver que estados con un mismo \mathbf{k} corresponden a velocidades completamente diferentes en cada banda, incluso en sentidos opuestos. Hay que recordar que el vector \mathbf{k} que identifica al estado no se corresponde con el impulso del electrón libre, $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$, ya que ahora la evolución de las funciones de onda está sujeta al potencial periódico. La información sobre el efecto de dicho potencial ya está incluida en la estructura de bandas.

Pasemos a los siguientes dos ítems:

- 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.

Bajo el modelo semiclásico, un campo eléctrico externo \mathbf{E} desplaza *de estado* a los electrones sobre la banda, a una *velocidad* $\dot{\mathbf{k}} = -(e/\hbar) \mathbf{E}$. Por lo tanto, para un campo $\mathbf{E} = E_y \hat{y}$, la componente⁴ $k_y(\tau) = -e E_y \tau/\hbar$, mientras que $k_x(\tau) = k_x(0)$ permanece constante. En particular, si $E_y = 0$ (ítem b), el estado del electrón no cambia y se mueve a su velocidad de grupo, de forma constante.

Para ver lo que ocurre con un campo eléctrico no nulo, reescribamos el resultado general de la velocidad en función de \mathbf{k} , factorizando el $\sin(ka)$ que aparece en todos los términos:

$$\dot{x} = \frac{a(t-t')}{\hbar} \sin(k_x a) [1 \pm \zeta(k_x, k_y)], \quad \dot{y} = \frac{a(t-t')}{\hbar} \sin(k_y a) [1 \pm \zeta(k_y, k_x)], \quad (10)$$

donde

$$\begin{aligned} \zeta(k_x, k_y) &= \frac{1}{t-t'} \frac{1}{2\Delta(\mathbf{k})} \frac{d\Delta^2}{dk_x} \\ &= \frac{t+t'}{t-t'} \frac{\cos(k_x a) - \cos(k_y a) - \left(\frac{4t''}{t+t'}\right)^2 \cos(k_x a) \sin^2(k_y a)}{\sqrt{[\cos(k_x a) - \cos(k_y a)]^2 + \left[\frac{4t''}{t+t'} \sin(k_x a) \sin(k_y a)\right]^2}}. \end{aligned} \quad (11)$$

Sin mirar en detalle la función ζ podemos ya ver cualitativamente dos aspectos de las trayectorias. Para eso, reemplacemos k_y por su expresión en función del tiempo. Esto nos da una velocidad variable en la dirección del campo aplicado

$$\begin{aligned} \dot{y} &= \frac{a(t-t')}{\hbar} \sin\left(-\frac{e E_y \tau}{\hbar} a\right) \left[1 \pm \zeta\left(-\frac{e E_y \tau}{\hbar}, k_x\right)\right] \\ &= v_0 \sin(-\omega\tau) [1 \pm \zeta(-\omega\tau/a, k_x)]. \end{aligned} \quad (12)$$

Primero, podemos identificar una escala característica de velocidad, $v_0 = \frac{a(t-t')}{\hbar}$, que nos dice que el electrón se moverá una distancia del orden del parámetro de red en un tiempo del orden de \hbar dividida por una energía del orden de la energía de salto. Para energías del orden del electrón-Volt y longitudes del orden del Armstrong, tenemos $v_0 \sim 10^5$ m/s. En segundo lugar, aparece una oscilación de frecuencia $\omega = e E_y a/\hbar$, llamada frecuencia de Bloch. Sorprendentemente, a pesar de que el campo aplicado es constante, ¡la velocidad de los electrones es alterna! Podemos, nuevamente, estimar un periodo para valores de campo eléctrico que podemos considerar *altos* en un contexto de laboratorio, por ejemplo, 1 kV/mm. Esto nos da un período $2\pi/\omega \sim 10^{-11}$ s. A pesar de parecer un tiempo muy corto, está por encima de los tiempos de relajación de muchos materiales, lo cual hizo difícil que se observaran estas oscilaciones experimentalmente

⁴Voy a usar τ para el tiempo ya que t puede confundirse con las energías de salto t , t' y t'' .

(el ejercicio 2 trata sobre esto). Por último, tenemos un factor $1 \pm \zeta$ que modula *de alguna forma* la oscilación (luego lo vemos).

Pasemos a ver qué ocurre con la componente de la velocidad transversal al campo aplicado. Para una partícula libre uno no esperaría que hubiera cambio alguno. Sin embargo, vemos que

$$\dot{x} = v_0 \sin(k_x a) [1 \pm \zeta(k_x, -\omega\tau/a)] \quad (13)$$

se compone de la velocidad constante hallada para el caso de campo nulo, $v_0 \sin(k_x a)$, pero modulada también por un factor $1 \pm \zeta$. Es decir, la velocidad transversal al campo también *puede* variar, y esto es consecuencia de la interacción con el potencial periódico de la red.

Para graficar más fácilmente las trayectorias, vamos a simplificar la función ζ suponiendo que $t'' \ll t + t'$, de forma que nos queda

$$\begin{aligned} \zeta(k_x, k_y) &\simeq \frac{t + t'}{t - t'} \frac{\cos(k_x a) - \cos(k_y a)}{\sqrt{[\cos(k_x a) - \cos(k_y a)]^2}} \\ &= \frac{t + t'}{t - t'} \frac{\cos(k_x a) - \cos(k_y a)}{|\cos(k_x a) - \cos(k_y a)|} = \frac{t + t'}{t - t'} \times \begin{cases} 1 & \text{si } \cos(k_x a) > \cos(k_y a) \\ 0 & \text{si } \cos(k_x a) = \cos(k_y a) \\ -1 & \text{si } \cos(k_x a) < \cos(k_y a) \end{cases} \end{aligned} \quad (14)$$

El término omitido por despreciar t'' simplemente suaviza el escalón, pero no modifica el hecho de que se produzca un cambio de signo. Resolveremos las trayectorias para la banda ϵ_1 (rebobinando, es la que corresponde al signo negativo del \pm), tomando tres casos para compararlas: (i) $k_x = 0$, (ii) $\pi/(2a)$ y (iii) π/a : En el caso (i), $\cos(0) = 1 \geq \cos(k_y)$, por lo que ζ nunca cambia de signo. Lo mismo pasa para en el caso (iii), pero con $\cos(\pi) = -1 \leq \cos(k_y)$. Por lo tanto, nos quedan

$$\dot{x} = v_0 \sin(0)[1 - \zeta(0, k_y)] = v_0 \sin(\pi)[1 - \zeta(0, k_y)] = 0 \quad (15)$$

en los casos (i) y (iii), mientras que⁵

$$\begin{aligned} \dot{y} &= v_0 \sin(\omega\tau)[1 - \zeta(k_y, k_x)] \\ &= v_0 \sin(\omega\tau) \left[1 \pm \frac{t + t'}{t - t'} \right] = \begin{cases} -(2t'a/\hbar) \sin(\omega\tau), & \text{para el caso (i),} \\ (2ta/\hbar) \sin(\omega\tau), & \text{para el caso (iii).} \end{cases} \end{aligned} \quad (16)$$

Por lo tanto, las trayectorias serán una oscilación paralela al eje y , de amplitud $2t'a/(\omega\hbar) = 2t'/(e E_y)$, para el caso (i), y $2t/(e E_y)$, para el caso (iii). Veamos ahora el caso (ii). Ahora tenemos que $\cos(k_x a) = \cos(\pi/2) = 0$. Por lo tanto, la función ζ cambia de signo cuando $\cos(k_y a)$ cambia de signo, es decir, cuando $|k_y a| = \pi/2$. Por lo tanto, debemos partir la trayectoria

$$\dot{x} = v_0 \sin(\pi/2)[1 - \zeta(\pi/(2a), k_y)] = \begin{cases} (2ta/\hbar), & \text{para } k_y a = \omega\tau < \pi/2 \\ -(2t'a/\hbar), & \text{para } k_y a = \omega\tau > \pi/2. \end{cases} \quad (17)$$

en **el primer semiperiodo**. Luego dada la periodicidad de las bandas, sabemos que cuando k_y cruce el borde de la 1ZB en π/a , *reaparecerá* en $-\pi/a$ y completará el ciclo con

$$\dot{x} = v_0 \sin(\pi/2)[1 - \zeta(\pi/(2a), k_y)] = \begin{cases} -(2t'a/\hbar), & \text{para } k_y a = \omega\tau < 3\pi/2, \\ (2ta/\hbar), & \text{para } k_y a = \omega\tau > 3\pi/2. \end{cases} \quad (18)$$

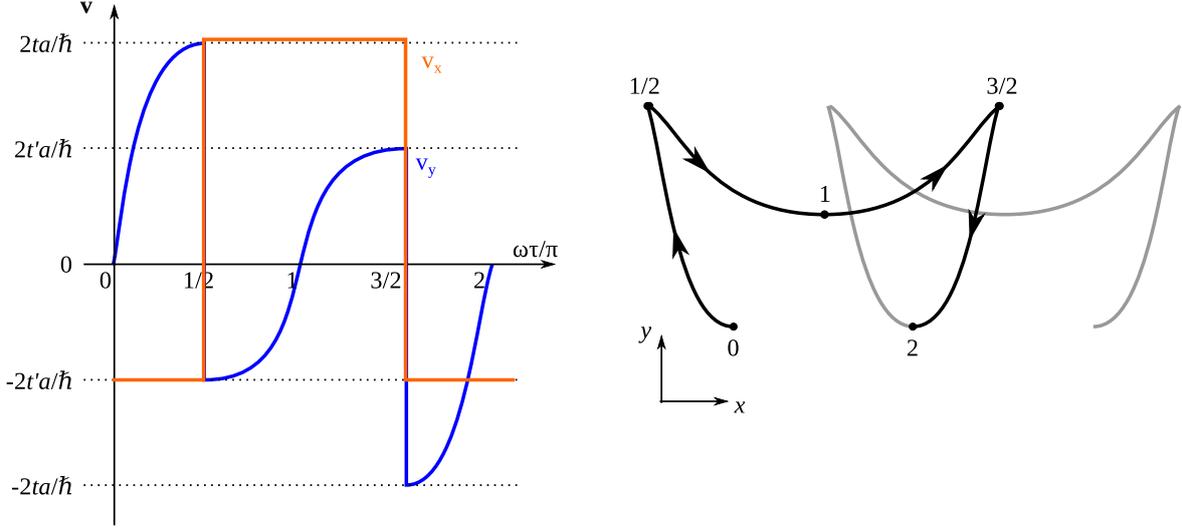
Con lo cual, el electrón se mueve en x alternando entre dos velocidades constantes de signos opuestos. Por último, repitamos el cálculo para la coordenada y : durante el semiperiodo en el

⁵No olvidar para determinar el signo que en la expresión de y las componentes están intercambiadas con respecto a la de x en la definición de ζ .

que $\cos(k_y a) > \cos(k_x a)$, tendremos un comportamiento idéntico al del caso (iii), mientras que en el otro semiperiodo, $\cos(k_y a) < \cos(k_x a)$ y la velocidad será la calculada en el caso (i). Es decir,

$$\dot{y} = v_0 \sin(\omega\tau) \left[1 \pm \frac{t+t'}{t-t'} \right] = \begin{cases} (2ta/\hbar) \sin(\omega\tau), & \text{para } k_y a = \omega\tau \in (0, \pi/2) \\ -(2t'a/\hbar) \sin(\omega\tau), & \text{para } k_y a = \omega\tau \in (\pi/2, 3\pi/2) \\ (2ta/\hbar) \sin(\omega\tau), & \text{para } k_y a = \omega\tau \in (3\pi/2, 2\pi) \end{cases} \quad (19)$$

Para trazar las trayectorias tenemos que trazar segmentos de cosenos teniendo en cuenta las distintas amplitudes en y y las distintas velocidades en x . Conviene tener a la vista las velocidades en función del tiempo para identificar correctamente cada tramo de la trayectoria.



Se ve que en cada ciclo el electrón vuelve a la misma coordenada y (su velocidad media en y es nula), mientras que en x avanza y retrocede, con una velocidad media no nula, por lo que en cada ciclo comienza en un valor de x mayor.

Ahora discutiremos sin entrar en el detalle de los cálculos los siguientes dos ítems del ejercicio:

- d) Calcule el tensor de masa efectiva.
- e) En esta banda, ¿la aceleración del electrón es paralela al \vec{E} aplicado? Justifique.

El ítem d) consiste en evaluar la expresión dada en la teórica,

$$[M^{-1}]_{ij} = \frac{\partial^2 \epsilon}{\partial k_i \partial k_j}. \quad (20)$$

En el punto anterior evaluamos la derivada primera, nos restaría volver a derivar para obtener M^{-1} y, finalmente, invertir la matriz para encontrar M . Esto nos dará una matriz que depende de \mathbf{k} y, salvo en puntos específicos, no será diagonal. Esto nos responde el ítem e), ya que por la definición del tensor de masa efectiva $M \cdot \dot{\mathbf{v}} = e \mathbf{E}$. Por lo tanto, si M no es diagonal, la aceleración $\dot{\mathbf{v}}$ no será necesariamente paralela al campo \mathbf{E} . De hecho, vimos antes que en la trayectoria que describe el electrón en el caso (ii) la componente x varía, aún con el campo aplicado en y , por lo tanto hay aceleración en la dirección transversal.

Para terminar, calculemos el tensor de conductividad, como nos pide el último ítem:

- f) Calcule el tensor de conductividad bajo el modelo semiclásico, sabiendo que cada átomo aporta un electrón y que el tiempo de relajación τ_R es independiente de \vec{k} .

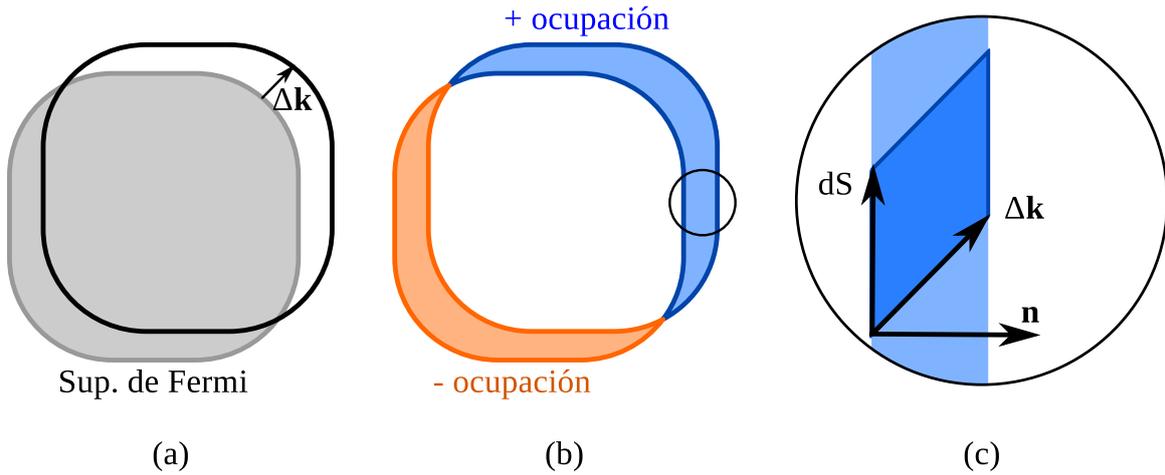
Este resultado se deduce más *formalmente* de la teoría cinética de Boltzmann. Dado que no se dio ese tema, haremos una deducción *con los dedos* que nos lleva al resultado correcto. Comencemos por recordar que la densidad de corriente viene dada por el aporte neto del movimiento de todos los electrones, es decir, es un promedio sobre las velocidad de los estados ocupados⁶

$$\mathbf{J} = -\frac{2e}{(2\pi)^2} \int_{\text{ocup.}} \mathbf{v}(\mathbf{k}) d^2\mathbf{k}. \quad (21)$$

Al aplicar un campo eléctrico no nulo, los electrones se mueven de estado $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k} - e\mathbf{E}\tau/\hbar$, pero debido a las interacciones con fonones e impurezas la perturbación introducida por el campo eléctrico *decae* en un tiempo característico denominado tiempo de relajación τ_R . Para la mayoría de los casos de interés, $e\mathbf{E}\tau_R/\hbar \ll \pi/a$. Es decir, la ocupación de los estados varía apenas en un entorno de la superficie de Fermi mucho más chico que el *tamaño* de la 1ZB. Sabemos además que a campo $\mathbf{E} = 0$, cuando la distribución de estados ocupados coincide con el llenado hasta el nivel de Fermi, debe ser $\mathbf{J} = 0$. Por lo tanto, la conducción se debe únicamente a aquellos electrones en la superficie de Fermi que, por efecto del campo aplicado, se corren ligeramente, generando un desbalance. Por lo tanto, podemos escribir

$$J_i = J_i - 0 = -\frac{2e}{(2\pi)^2} \left\{ \int_{\epsilon \leq E_F} v_i(\mathbf{k} - e\mathbf{E}\tau_R/\hbar) d^2\mathbf{k} - \int_{\epsilon \leq E_F} v_i(\mathbf{k}) d^2\mathbf{k} \right\}. \quad (22)$$

Podemos ver gráficamente el sentido de escribir esta diferencia:



En el panel (a), el campo eléctrico desplaza los estados ocupados en $\Delta\mathbf{k} = -e\mathbf{E}\tau/\hbar$, como si la superficie de Fermi se corriera con respecto a su posición en equilibrio. El resultado neto se muestra en el panel (b), donde lo que ocurre es que los estados que están de un lado de la superficie de Fermi se ocupan, liberando los estados del lado opuesto. Como el corrimiento es pequeño, $v_i(\mathbf{k} + \Delta\mathbf{k}) \simeq v_i(\mathbf{k})$ y podemos cambiar la integral de área (volumen en 3D) por una integral de camino (superficie en 3D) sobre la superficie de Fermi, donde cada estado \mathbf{k} deberá ser ponderado por el cambio de la ocupación en su entorno inmediato. Esto parece complicado en palabras, pero mirando el panel (c) vemos que el cambio de ocupación en un entorno de un punto \mathbf{k} sobre la superficie de Fermi es proporcional a la proyección de $\Delta\mathbf{k}$ sobre la dirección normal de la superficie de Fermi. Y como esta es una superficie de nivel,

$$\hat{\mathbf{n}} = \frac{\nabla\epsilon}{|\nabla\epsilon|} = \frac{\mathbf{v}}{|\mathbf{v}|}. \quad (23)$$

⁶En la teoría se dio la expresión en 3D donde aparece como $2/(2\pi)^3 = 1/(4\pi^3)$. El 2 en el numerador es por la degeneración de espín, mientras que el $(2\pi)^d$ viene de la densidad de estados.

Finalmente nos queda, para cada banda,

$$J_i = -\frac{2e}{(2\pi)^2} \oint_{\epsilon=E_F} v_i(\mathbf{k}) \hat{\mathbf{n}} \cdot \Delta \mathbf{k} \, dS = \sum_j \frac{2e^2 \tau E_j}{(2\pi)^2 \hbar} \oint_{\epsilon=E_F} \frac{v_i(\mathbf{k}) v_j(\mathbf{k})}{|\mathbf{v}(\mathbf{k})|} \, dS, \quad (24)$$

de donde se deduce que el tensor de conductividad σ_{ij} , tal que $J_i = \sum_j \sigma_{ij} E_j$, vale

$$\sigma_{ij} = \frac{2e^2 \tau}{(2\pi)^2 \hbar} \oint_{\epsilon=E_F} \frac{v_i(\mathbf{k}) v_j(\mathbf{k})}{|\mathbf{v}(\mathbf{k})|} \, dS, \quad (25)$$

sumado sobre todas las bandas parcialmente llenas.

Ahora aplicaremos este resultado al sistema que vinimos tratando, repitiendo algunas aproximaciones que ya discutimos para simplificar el problema: (i) haremos el cálculo para la banda ϵ_2 semillena, cuya superficie de Fermi habíamos aproximado por un cuadrado de lado $2\bar{k}$ centrado en el punto Γ ; (ii) evaluaremos las velocidades despreciando t'' . Vamos a partir la integral en cada uno de los cuatro lados, comenzando por el lado de $k_x = \bar{k}$ constante. Aquí vamos a integrar sobre $k_y \in [-\bar{k}, \bar{k}]$, por lo tanto $\cos(k_y a) \geq \cos(\bar{k} a)$ y resultan

$$v_x = -\frac{2t'a}{\hbar} \sin(\bar{k} a), \quad v_y = \frac{2ta}{\hbar} \sin(k_y a). \quad (26)$$

Usando estas velocidades, la contribución de este *lado* al tensor de conductividad es

$$\sigma_{xx}^{(I)} = \frac{2e^2 \tau}{(2\pi)^2 \hbar} \int_{-\bar{k}}^{\bar{k}} \frac{v_x(\bar{k}, k_y) v_x(\bar{k}, k_y)}{|\mathbf{v}(\bar{k}, k_y)|} \, dk_y \quad (27)$$

$$= \frac{2e^2 \tau}{(2\pi)^2 \hbar} \int_{-\bar{k}}^{\bar{k}} \frac{[t' \sin(\bar{k} a)]^2}{\sqrt{[t' \sin(\bar{k} a)]^2 + [t \sin(k_y a)]^2}} \, dk_y \quad (28)$$

$$= \frac{2e^2 \tau t' \sin(\bar{k} a)}{(2\pi)^2 \hbar} \int_{-\bar{k}}^{\bar{k}} \frac{1}{\sqrt{1 + q^2 \sin^2(k_y a)}} \, dk_y \quad (29)$$

$$= \frac{2e^2 \tau t' \sin(\bar{k} a)}{(2\pi)^2 \hbar} \frac{2F(\bar{k} a | q^2)}{a}, \quad (30)$$

donde $q = t/[t' \sin(\bar{k} a)]$ y $F(x|m)$ es la integral elíptica de primer tipo.⁷ Para los otros elementos del tensor

$$\sigma_{yx}^{(I)} = \sigma_{xy}^{(I)} = \frac{2e^2 \tau}{(2\pi)^2 \hbar} \int_{-\bar{k}}^{\bar{k}} \frac{v_x(\bar{k}, k_y) v_y(\bar{k}, k_y)}{|\mathbf{v}(\bar{k}, k_y)|} \, dk_y \quad (31)$$

$$= \frac{2e^2 \tau}{(2\pi)^2 \hbar} \int_{-\bar{k}}^{\bar{k}} \frac{t' \sin(\bar{k} a) t \sin(k_y a)}{\sqrt{[t' \sin(\bar{k} a)]^2 + [t \sin(k_y a)]^2}} \, dk_y \quad (32)$$

$$= \frac{2e^2 \tau t}{(2\pi)^2 \hbar} \int_{-\bar{k}}^{\bar{k}} \frac{\sin(k_y a)}{\sqrt{1 + q^2 \sin^2(k_y a)}} \, dk_y \quad (33)$$

$$= 0, \quad (34)$$

porque el integrando es impar y la integral es simétrica respecto del cero, y

$$\sigma_{yy}^{(I)} = \frac{2e^2 \tau}{(2\pi)^2 \hbar} \int_{-\bar{k}}^{\bar{k}} \frac{v_y(\bar{k}, k_y) v_y(\bar{k}, k_y)}{|\mathbf{v}(\bar{k}, k_y)|} \, dk_y \quad (35)$$

⁷Esto está en tablas, no se enreden. ¡Es difícil encontrar ejemplos con integrales fáciles!

$$= \frac{2 e^2 \tau}{(2\pi)^2 \hbar} \int_{-\bar{k}}^{\bar{k}} \frac{[t \sin(k_y a)]^2}{\sqrt{[t' \sin(\bar{k}a)]^2 + [t \sin(k_y a)]^2}} dk_y \quad (36)$$

$$= \frac{2 e^2 \tau t^2}{(2\pi)^2 \hbar t' \sin(\bar{k}a)} \int_{-\bar{k}}^{\bar{k}} \frac{\sin^2(k_y a)}{\sqrt{1 + q^2 \sin^2(k_y a)}} dk_y \quad (37)$$

$$= \frac{2 e^2 \tau t^2}{(2\pi)^2 \hbar t' \sin(\bar{k}a)} \frac{2[E(\bar{k}a| - q^2) - F(\bar{k}a| - q^2)]}{a q^2} \quad (38)$$

$$= \frac{2 e^2 \tau t' \sin(\bar{k}a)}{(2\pi)^2 \hbar} \frac{2[E(\bar{k}a| - q^2) - F(\bar{k}a| - q^2)]}{a}, \quad (39)$$

donde $E(x|m)$ es la integral elíptica de segundo tipo.

Por la simetría de la red cuadrada, podemos prever que la integral sobre $k_x \in [-\bar{k}, \bar{k}]$ en el lado (II) con $k_y = \bar{k}$ constante nos dará idénticos resultados, cambiando x por y . De la misma forma, por paridad, las integrales sobre lados opuestos (III y IV) darán el mismo resultado. De esta forma,

$$\sigma_{xx} = \sigma_{xx}^{(I)} + \sigma_{xx}^{(II)} + \sigma_{xx}^{(III)} + \sigma_{xx}^{(IV)} \quad (40)$$

$$= \sigma_{xx}^{(I)} + \sigma_{yy}^{(I)} + \sigma_{xx}^{(I)} + \sigma_{yy}^{(I)} \quad (41)$$

$$= \frac{2 e^2 \tau t' \sin(\bar{k}a)}{\pi^2 \hbar a} \left[F(\bar{k}a|q^2) + E(\bar{k}a| - q^2) - F(\bar{k}a| - q^2) \right]. \quad (42)$$

Por los mismos argumentos de simetría, $\sigma_{yy} = \sigma_{xx}$ y $\sigma_{xy} = \sigma_{yx} = 0$.