

Dinámica electrónica

Prof. Alberto Camjaya

Introducción

¿Cómo es la dinámica electrónica?

Habiendo introducido el potencial periódico en la descripción de la estructura electrónica, es necesario extender las ideas de Drude y Sommerfeld para describir la dinámica en presencia de fuerzas externas, como los campos eléctricos y magnéticos.

Comenzaremos por describir la dinámica de equilibrio, ya que por ahora no incluiremos efectos disipativos.

La descripción completa del problema escapa al alcance del curso, por lo cual presentaremos una visión aproximada que, sin embargo, da cuenta de gran parte de los fenómenos:

La aproximación semiclásica

Introducción

Aproximación semiclásica

Los estados de Bloch son deslocalizados, se extienden por todo el cristal. Para describir un “electrón” por lo tanto utilizaremos un paquete de onda formado por la superposición de estados pertenecientes **a una misma banda**:

$$\psi_n(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}} g(\mathbf{k}) \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \varepsilon_n(\mathbf{k}) t \right]$$

con $g(\mathbf{k}) \neq 0$ si $|\mathbf{k} - \mathbf{k}_0| < \Delta k$. Si el ancho del paquete se elige pequeño comparado con la 1BZ, la energía variará poco en su extensión y la velocidad de grupo es

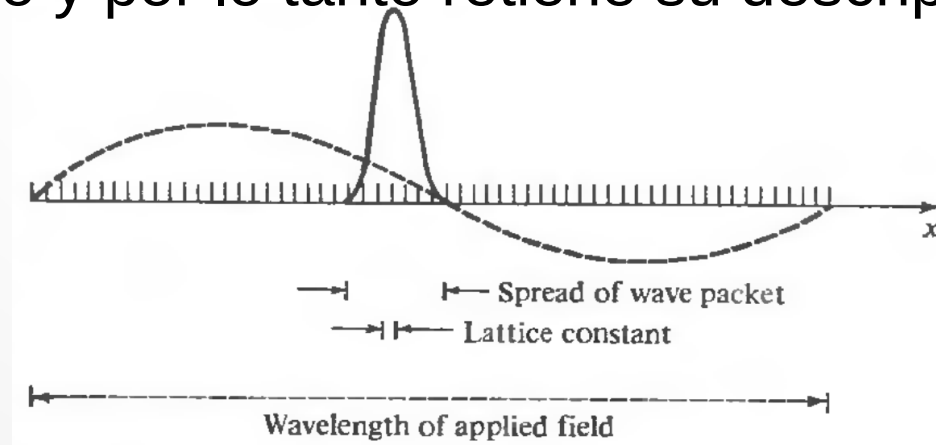
$$\frac{\partial \omega}{\partial \mathbf{k}} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_n}{\partial \mathbf{k}} \Big|_{\mathbf{k}_0} = \mathbf{v}_n(\mathbf{k}_0)$$

Introducción

Aproximación semiclásica

Cuanto más angosto el paquete en el espacio de momentos, por Fourier, más ancho será en posición. Así un paquete bien definido en la RR, con un ancho mucho menor al tamaño de la BZ, dará un paquete que se extiende por varias celdas unidad.

En el modelo semiclásico, los campos se supondrán que cambian lentamente en la escala del paquete de ondas (serán clásicos) mientras que el potencial periódico varía en distancias menores al mismo y por lo tanto retiene su descripción cuántica.



Teoría

Aproximación semiclásica

Hipótesis.

- El índice de banda es una constante. Se ignora la posibilidad de transiciones inter-banda (campos débiles).
- La evolución temporal esta dada por las ecuaciones:

$$\dot{\mathbf{r}} = \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_n(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}}$$
$$\hbar \dot{\mathbf{k}} = -e \left[\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{c} \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) \right]$$

Teoría

Aproximación semiclásica

Hipótesis.

- El índice de banda es una constante. Se ignora la posibilidad de transiciones inter-banda (campos débiles).
- La evolución temporal esta dada por las ecuaciones:

$$\hbar \dot{\mathbf{k}} = -e \left[\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{c} \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) \right]$$

La justificación formal de esta relación es compleja [ver Marder], pero una justificación heurística puede darse a través de la transferencia de energía.

Teoría

Aproximación semiclásica

Hipótesis.

- El índice de banda es una constante. Se ignora la posibilidad de transiciones inter-banda (campos débiles).
- La evolución temporal esta dada por las ecuaciones:

La energía transferida por unidad de tiempo (potencia) si una fuerza actúa sobre el electrón es

$$\mathbf{v}_n(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{F} = \frac{d\varepsilon_n(\mathbf{k})}{dt} = \frac{\partial \varepsilon_n(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \cdot \dot{\mathbf{k}} = \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) \cdot (\hbar \dot{\mathbf{k}})$$

$$\implies \mathbf{F} = \hbar \dot{\mathbf{k}}$$

Teoría

Aproximación semiclásica

Comentarios.

Todas las predicciones del modelo dependen **solamente** de la estructura particular de las bandas.

Como no estamos incluyendo transiciones inter-banda, solo es necesario tomar en cuenta las bandas ocupadas.

Volvamos a recordar que ***¡el momento cristalino no es el momento del electrón!***

Por último, recordemos que los campos deben ser de baja intensidad (menores que el punto de ruptura dieléctrica o magnética), de baja frecuencia $\hbar\omega \ll \epsilon_{\text{gap}}$ (o habría transiciones por absorción de fotones) y que varíen lentamente en el espacio, $\lambda \gg a$.

Teoría

Extra: funciones periódicas en la red

Si $f(\mathbf{r})$ es una función periódica en la RD y C una celda primitiva, entonces la integral

$$I(\mathbf{r}') = \int_C d\mathbf{r} f(\mathbf{r} + \mathbf{r}')$$

es independiente de la coordenada primada. En particular:

$$\nabla' I(\mathbf{r}') = \int_C d\mathbf{r} \nabla' f(\mathbf{r} + \mathbf{r}') = \int_C d\mathbf{r} \nabla f(\mathbf{r} + \mathbf{r}') = 0$$

$$\nabla'^2 I(\mathbf{r}') = \int_C d\mathbf{r} \nabla'^2 f(\mathbf{r} + \mathbf{r}') = \int_C d\mathbf{r} \nabla^2 f(\mathbf{r} + \mathbf{r}') = 0$$

Teoría

Extra: funciones periódicas en la red

Si $f(\mathbf{r})$ es una función periódica en la RD y C una celda primitiva, entonces la integral

$$I(\mathbf{r}') = \int_C d\mathbf{r} f(\mathbf{r} + \mathbf{r}')$$

es independiente de la coordenada primada. Evaluando en $\mathbf{r}' = 0$

$$\int_C d\mathbf{r} \nabla f(\mathbf{r}) = 0$$

$$\int_C d\mathbf{r} \nabla^2 f(\mathbf{r}) = 0$$

Teoría

Aproximación semiclásica

Comentarios.

En una banda llena (con energías debajo del potencial químico):

$$\mathbf{j} = (-e) \int_{1\text{BZ}} \frac{d\mathbf{k}}{4\pi^3} \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_n(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} = 0.$$

Por lo tanto solo debemos concentrarnos en las bandas parcialmente ocupadas.

Teoría

Agujeros

Otro logro de la teoría semiclásica es la existencia de portadores de carga positivos (vistos en experimentos Hall). En una banda parcialmente llena:

$$\mathbf{j} = (-e) \int_{\text{ocupados}} \frac{d\mathbf{k}}{4\pi^3} \mathbf{v}(\mathbf{k}).$$

Como la banda completa no conduce:

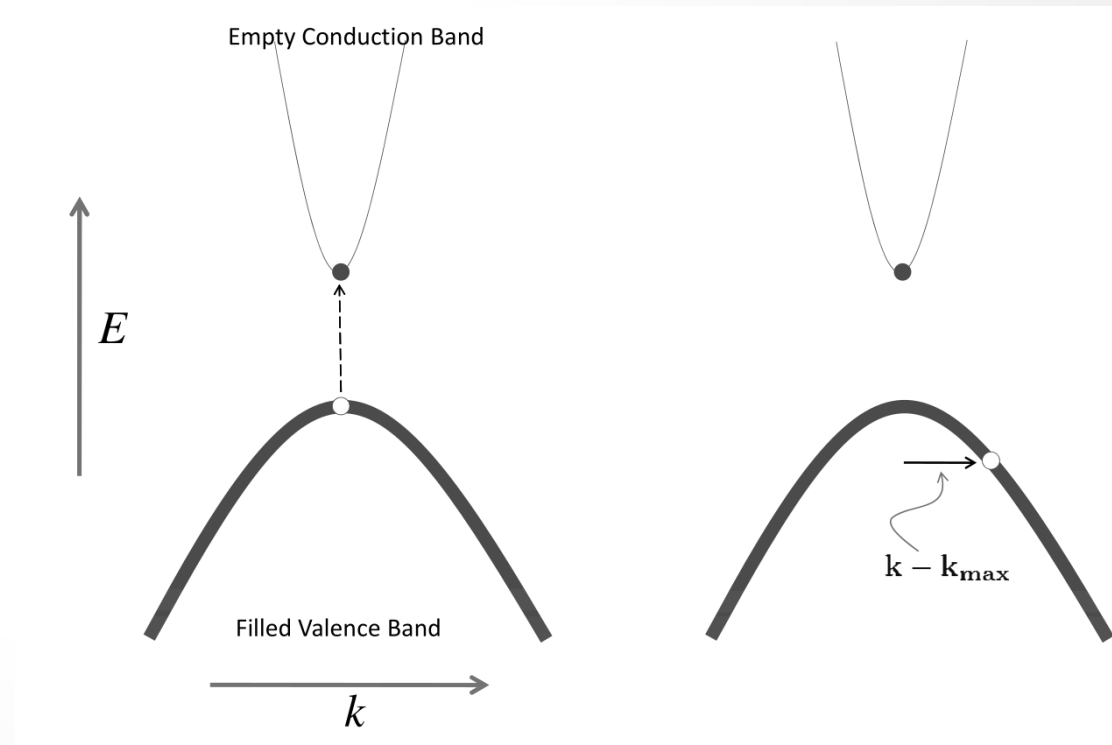
$$0 = \int_{1\text{BZ}} \frac{d\mathbf{k}}{4\pi^3} \mathbf{v}(\mathbf{k}) = \int_{\text{ocupados}} \frac{d\mathbf{k}}{4\pi^3} \mathbf{v}(\mathbf{k}) + \int_{\text{desocupados}} \frac{d\mathbf{k}}{4\pi^3} \mathbf{v}(\mathbf{k})$$

$$\implies \mathbf{j} = (+e) \int_{\text{desocupados}} \frac{d\mathbf{k}}{4\pi^3} \mathbf{v}(\mathbf{k}).$$

Teoría

Agujeros

Así, cuando sea conveniente, podemos pensar a los portadores de corriente como “partículas” de carga positiva: los agujeros (holes).



Teoría

Masa efectiva

La aceleración de los electrones de Bloch en la dirección x esta dada por:

$$\dot{v}_x = \frac{d}{dt} \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_n(\mathbf{k})}{\partial k_x} = \frac{1}{\hbar} \sum_{i=x,y,z} \frac{\partial^2 \varepsilon_n(\mathbf{k})}{\partial k_x \partial k_i} \dot{k}_i = \frac{1}{\hbar^2} \sum_{i=x,y,z} \frac{\partial^2 \varepsilon_n(\mathbf{k})}{\partial k_x \partial k_i} F_i$$

Para las otras direcciones el resultado es análogo. Dado que el cociente entre fuerza y aceleración es la masa, podemos generalizar el concepto introduciendo el tensor de masa:

$$[\mathbb{M}_n(\mathbf{k})]_{ij}^{-1} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \varepsilon_n(\mathbf{k})}{\partial k_i \partial k_j}$$

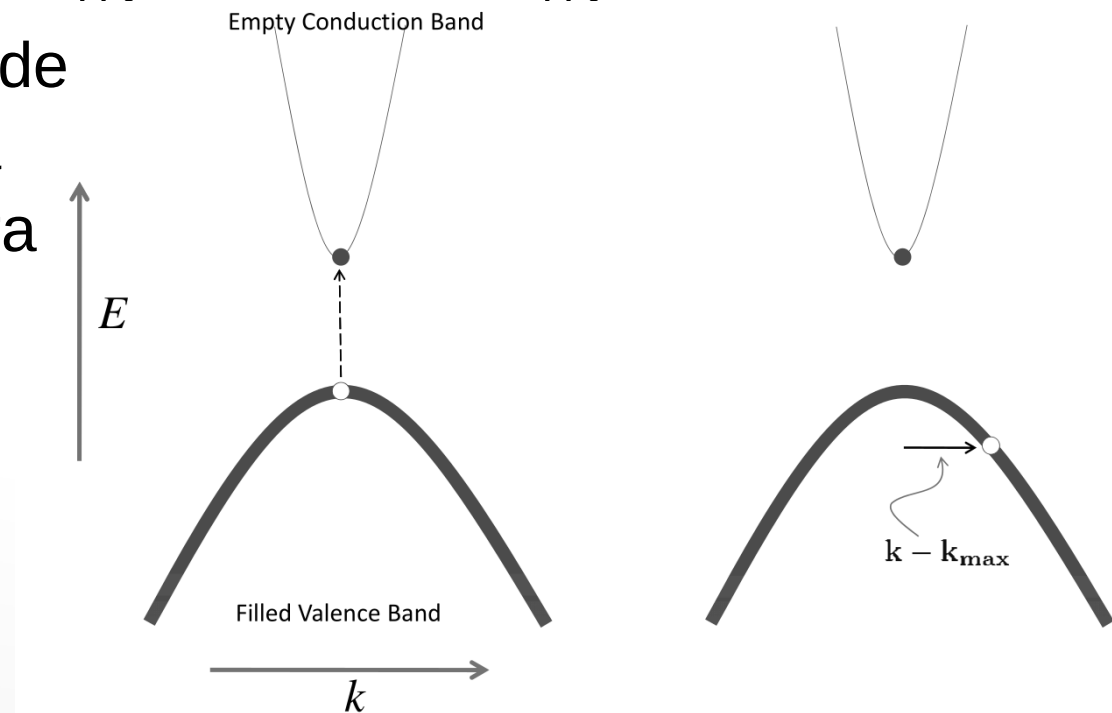
Teoría

Masa efectiva

Si un campo eléctrico es aplicado a un cristal, el sistema responde siguiendo las ecuaciones semiclásicas. Por lo visto anteriormente

$$\dot{\mathbf{v}} = \mathbb{M}_n^{-1}(-e\mathbf{E}) \rightarrow \frac{1}{m^*} \mathbb{I}(-e\mathbf{E}) = \frac{1}{m^*} \mathbb{I}\hbar\dot{\mathbf{k}}$$

Para electrones en la banda de conducción, la masa efectiva es positiva y entonces acelera en la misma dirección que $\dot{\mathbf{k}}$ (contrario al campo, carga negativa).



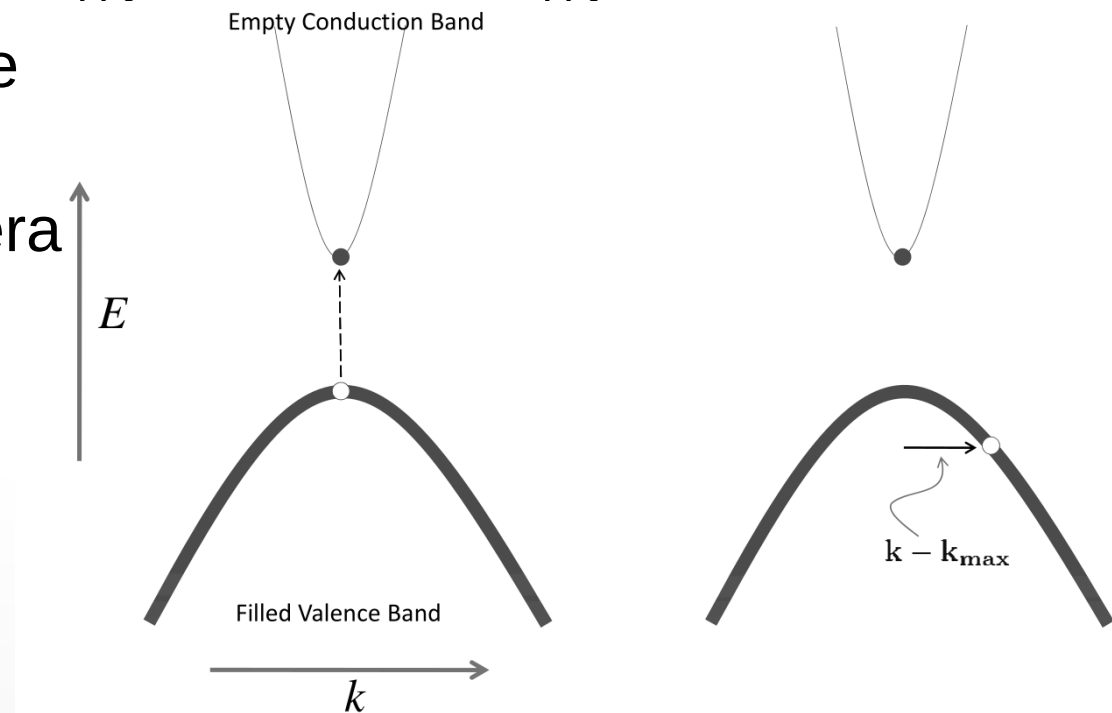
Teoría

Masa efectiva

Si un campo eléctrico es aplicado a un cristal, el sistema responde siguiendo las ecuaciones semiclásicas. Por lo visto anteriormente

$$\dot{\mathbf{v}} = \mathbb{M}_n^{-1}(-e\mathbf{E}) \rightarrow \frac{1}{m^*} \mathbb{I}(-e\mathbf{E}) = \frac{1}{m^*} \mathbb{I}\hbar\dot{\mathbf{k}}$$

Para agujeros en la banda de valencia, la masa efectiva es negativa y entonces acelera en dirección opuesta a $\dot{\mathbf{k}}$ (paralelo al campo, carga positiva o masa negativa).



Teoría

Masa efectiva

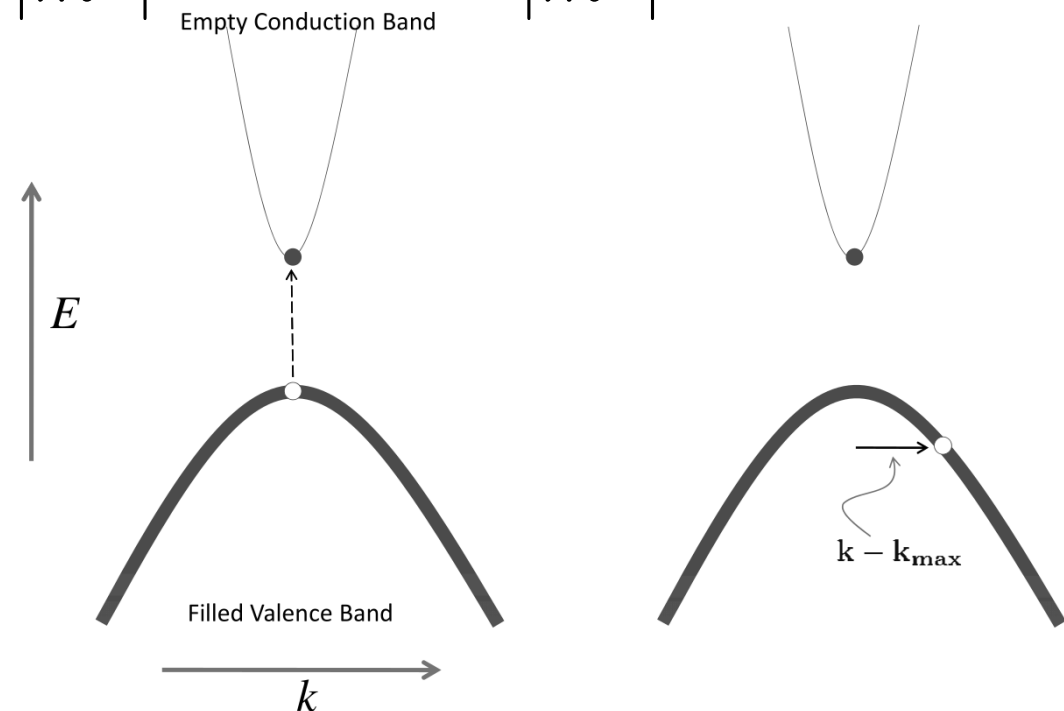
Si un campo eléctrico es aplicado a un cristal, el sistema responde siguiendo las ecuaciones semiclásicas. Por lo visto anteriormente

$$\dot{\mathbf{v}} = \mathbb{M}_n^{-1}(-e\mathbf{E}) \rightarrow \frac{-1}{|m^*|} \mathbb{I}(-e\mathbf{E}) = \frac{-1}{|m^*|} \mathbb{I}\hbar\dot{\mathbf{k}}$$

La convención usual es definir la masa positiva y aplicar el signo explícitamente.

Por lo tanto el agujero “tiene” carga positiva.

$$[\mathbb{M}_n(\mathbf{k})]_{ij}^{-1} = \pm \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \varepsilon_n(\mathbf{k})}{\partial k_i \partial k_j}$$



Teoría

Masa efectiva

En términos de la masa efectiva, dado que

$$\mathbf{a} = \dot{\mathbf{v}} = \pm \mathbb{M}_n^{-1}(\mathbf{k}) \hbar \dot{\mathbf{k}},$$

la segunda de las ecuaciones semiclásicas puede llevarse a la forma

$$\mathbb{M}(\mathbf{k})\mathbf{a} = \mp \left[\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{c} \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) \right].$$

Ejemplos

Campo eléctrico uniforme y constante

Las ecuaciones son

$$\dot{\mathbf{r}} = \mathbf{v}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}}$$

$$\hbar \dot{\mathbf{k}} = -e\mathbf{E} \Rightarrow \mathbf{k} = -\frac{e\mathbf{E}}{\hbar} t + \mathbf{k}_0$$

$$\Rightarrow \mathbf{v}(\mathbf{k}) = \mathbf{v} \left(\mathbf{k}_0 - \frac{e\mathbf{E}}{\hbar} t \right)$$

Ejemplos

Campo eléctrico uniforme y constante

Las ecuaciones son

$$\dot{\mathbf{r}} = \mathbf{v}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}}$$

$$\hbar \dot{\mathbf{k}} = -e\mathbf{E} \Rightarrow \mathbf{k} = -\frac{e\mathbf{E}}{\hbar}t + \mathbf{k}_0$$

$$\Rightarrow \mathbf{v}(\mathbf{k}) = \mathbf{v}\left(\mathbf{k}_0 - \frac{e\mathbf{E}}{\hbar}t\right)$$

Los \mathbf{k} 'es se corren todos por igual

Como la velocidad es periódica en la RR debe ser acotada. Si además el campo es paralelo a un vector de la RR, entonces la velocidad es una función periódica del tiempo, ¡oscila!

Ejemplos

Campo eléctrico uniforme y constante

Ejemplo en 1D, banda coseno:

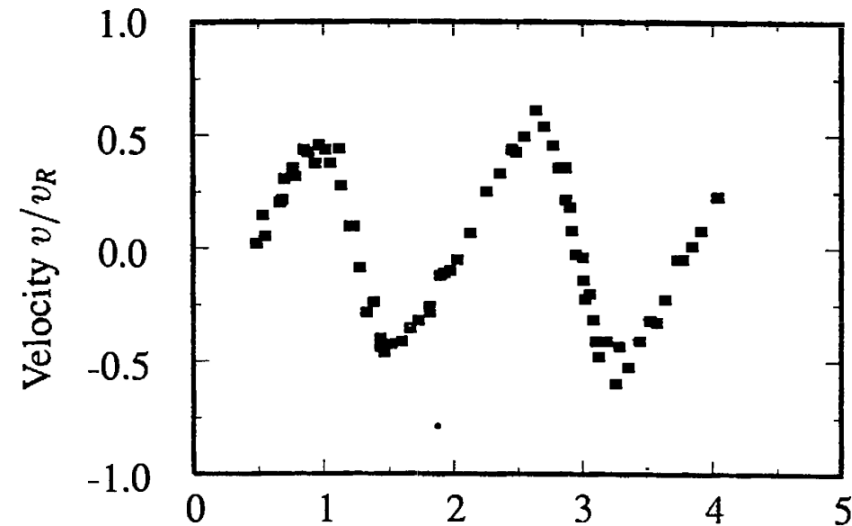
$$\varepsilon(k) = -2t \cos(ka)$$

$$v(k) = \frac{2t}{\hbar} \sin(ka) = v_0 - \frac{2t}{\hbar} \sin\left(\frac{eEa}{\hbar}t\right)$$

Oscilaciones de Bloch

¡Un campo dc puede inducir una corriente alterna!

Muy difícil, en la práctica se requieren muestras muy puras.



Phys. Rev. Lett. 76, 4508 (1996) Time $t/[v_R/a]$

Ejemplos

Campo magnético uniforme y constante

Las ecuaciones son

$$\dot{\mathbf{r}} = \mathbf{v}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \qquad \hbar \dot{\mathbf{k}} = -e \frac{\mathbf{v}(\mathbf{k})}{c} \times \mathbf{H}$$

El problema tiene dos constantes de movimiento:

- La componente de $\mathbf{k} \parallel \mathbf{H}$:

$$\frac{d(\mathbf{k} \cdot \mathbf{H})}{dt} = \frac{d\mathbf{k}}{dt} \cdot \mathbf{H} = - \left(e \frac{\mathbf{v}(\mathbf{k})}{c} \times \mathbf{H} \right) \cdot \mathbf{H} = 0$$

$$\implies \mathbf{k}_{\parallel} = \text{cte.}$$

Ejemplos

Campo magnético uniforme y constante

Las ecuaciones son

$$\dot{\mathbf{r}} = \mathbf{v}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \qquad \hbar \dot{\mathbf{k}} = -e \frac{\mathbf{v}(\mathbf{k})}{c} \times \mathbf{H}$$

El problema tiene dos constantes de movimiento:

- La energía $\varepsilon(\mathbf{k})$:

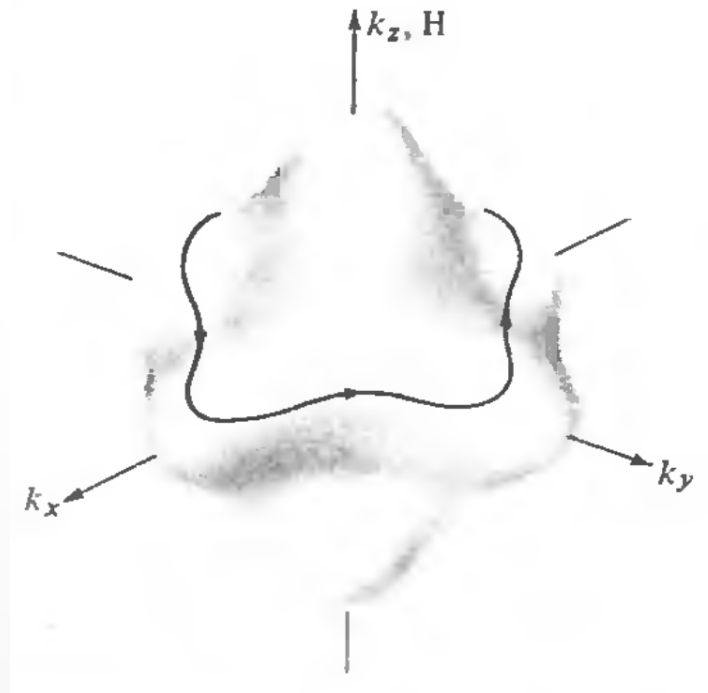
$$\begin{aligned} \frac{d\varepsilon(\mathbf{k})}{dt} &= \frac{\partial \varepsilon(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \cdot \dot{\mathbf{k}} = -\frac{e}{c} \frac{\partial \varepsilon(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \cdot (\mathbf{v}(\mathbf{k}) \times \mathbf{H}) = \\ &= -\frac{\hbar e}{c} \mathbf{v}(\mathbf{k}) \cdot (\mathbf{v}(\mathbf{k}) \times \mathbf{H}) = 0 \end{aligned}$$

Ejemplos

Campo magnético uniforme y constante

Las conservaciones determinan el movimiento.

Los electrones se mueven a lo largo de curvas de intersección entre las superficies de energía constante y los planos perpendiculares al campo magnético.



Ejemplos

Campo magnético uniforme y constante

Las trayectorias en el espacio real, en un plano perpendicular al campo, $\mathbf{r}_\perp = \mathbf{r} - \hat{\mathbf{H}}(\hat{\mathbf{H}} \cdot \mathbf{r})$, son

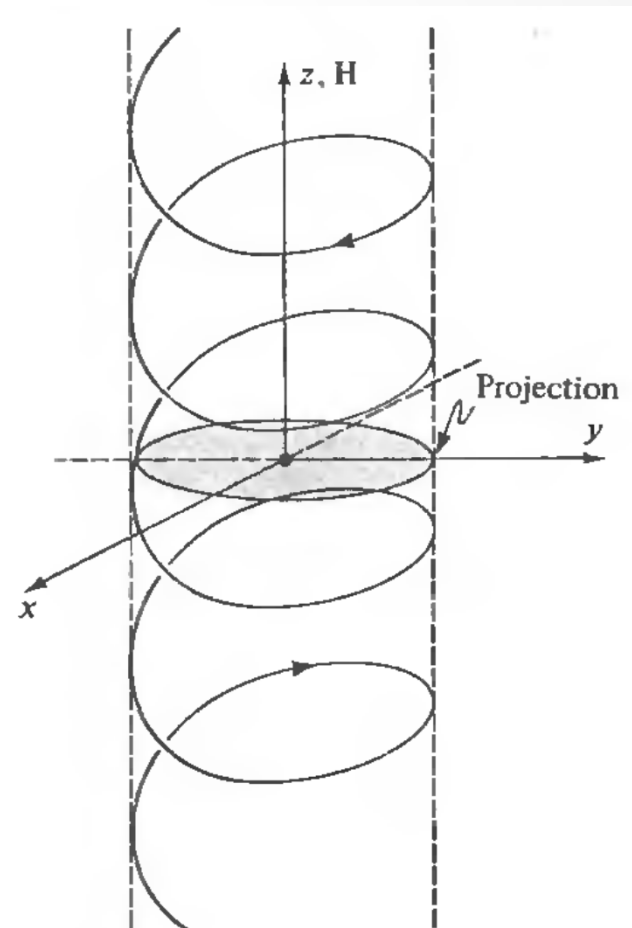
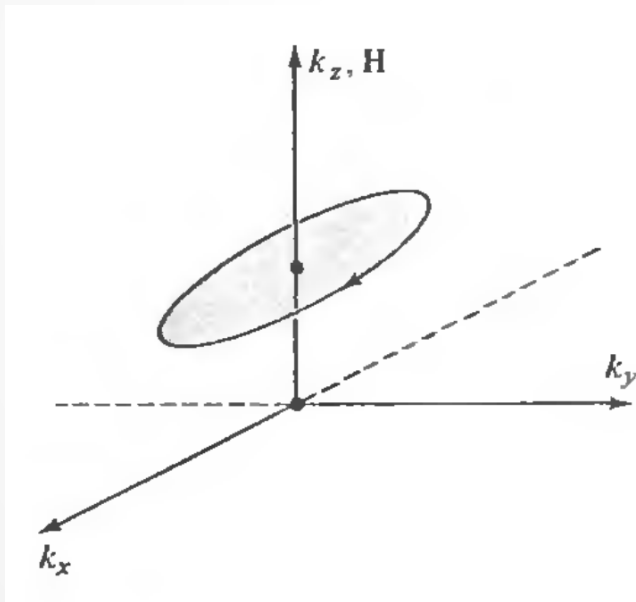
$$\hat{\mathbf{H}} \times \hbar \dot{\mathbf{k}} = -\frac{e}{c} \hat{\mathbf{H}} \times (\mathbf{v} \times \mathbf{H}) = -\frac{eH}{c} \left(\mathbf{v} - \hat{\mathbf{H}}(\hat{\mathbf{H}} \cdot \mathbf{v}) \right) = -\frac{eH}{c} \mathbf{v}_\perp$$

$$\implies \mathbf{r}_\perp(t) - \mathbf{r}_\perp(0) = -\frac{\hbar c}{eH} \hat{\mathbf{H}} \times (\mathbf{k}(t) - \mathbf{k}(0))$$

Ejemplos

Campo magnético uniforme y constante

Las trayectorias en el espacio real, en un plano perpendicular al campo, son las mismas que el espacio recíproco rotadas a 90° y multiplicadas por el factor $\hbar c/eH$.



Ejemplos

Campo magnético uniforme y constante

Las trayectorias en el espacio real, paralelas al campo no son tan sencillas.

Aunque \mathbf{k}_{\parallel} es trivial (constante), $\mathbf{v}_{\parallel} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathbf{k}_{\parallel}}$ no lo es necesariamente.

Las órbitas no son siempre cerradas.

Para las órbitas cerradas, se puede ver que el período está dado por

$$T(\varepsilon, \mathbf{k}_{\parallel}) = \frac{\hbar^2 c}{eH} \frac{\partial A(\varepsilon, \mathbf{k}_{\parallel})}{\partial \varepsilon}$$

donde $A(\varepsilon, \mathbf{k}_{\parallel})$ es el área encerrada por la órbita.

Ejemplos

Campo eléctrico y magnético

Consideremos un campo eléctrico y otro magnético perpendiculares, ambos uniformes y constantes.

En este caso, la órbita en el espacio real, proyectada en un plano perpendicular al campo magnético, adquiere otro término:

$$\hat{\mathbf{H}} \times \hbar \dot{\mathbf{k}} = -e\hat{\mathbf{H}} \times \mathbf{E} - \frac{eH}{c} \mathbf{v}_{\perp}.$$

Al integrar, el campo eléctrico agrega un término de “arrastre”:

$$\mathbf{r}_{\perp}(t) - \mathbf{r}_{\perp}(0) = -\frac{\hbar c}{eH} \hat{\mathbf{H}} \times (\mathbf{k}(t) - \mathbf{k}(0)) + \frac{cE}{H} \left(\hat{\mathbf{E}} \times \hat{\mathbf{H}} \right) t$$

$$\equiv -\frac{\hbar c}{eH} \hat{\mathbf{H}} \times (\mathbf{k}(t) - \mathbf{k}(0)) + \mathbf{w}t$$

Ejemplos

Campo eléctrico y magnético

Consideremos un campo eléctrico y otro magnético perpendiculares, ambos uniformes y constantes.

Para hallar la órbita en el espacio k , haremos uso de que los campos son perpendiculares:

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_{\perp} = (\mathbf{H} \cdot \hat{\mathbf{H}}) \frac{\mathbf{E}}{H} - \left(\mathbf{H} \cdot \frac{\mathbf{E}}{H} \right) \hat{\mathbf{H}} = \mathbf{H} \times \frac{(\mathbf{E} \times \hat{\mathbf{H}})}{H}$$

Esta identidad puede reemplazarse en las ecuaciones.

Ejemplos

Campo eléctrico y magnético

Consideremos un campo eléctrico y otro magnético perpendiculares, ambos uniformes y constantes.

$$\hbar \dot{\mathbf{k}} = -e\mathbf{E} - e\frac{\mathbf{v}}{c} \times \mathbf{H} = -e\mathbf{H} \times \frac{(\mathbf{E} \times \hat{\mathbf{H}})}{H} - \frac{e}{c\hbar} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathbf{k}} \times \mathbf{H}$$

$$= -\frac{e}{c\hbar} \left[\frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathbf{k}} - \frac{c\hbar}{H} (\mathbf{E} \times \hat{\mathbf{H}}) \right] \times \mathbf{H}$$

$$= -\frac{e}{c\hbar} \left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} (\varepsilon - \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{w}) \right] \times \mathbf{H} = -\frac{e}{c\hbar} \frac{\partial \tilde{\varepsilon}}{\partial \mathbf{k}} \times \mathbf{H}$$

$$= -\frac{e}{c} \tilde{\mathbf{v}} \times \mathbf{H}$$

$$\text{con } \tilde{\varepsilon} = \varepsilon - \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{w} \text{ y } \mathbf{w} = \frac{cE}{H} (\hat{\mathbf{E}} \times \hat{\mathbf{H}}).$$

Ejemplos

Campo eléctrico y magnético

Consideremos un campo eléctrico y otro magnético perpendiculares, ambos uniformes y constantes.

El problema se reduce al movimiento de un electrón en un campo magnético uniforme y constante

$$\hbar \dot{\mathbf{k}} = -\frac{e}{c\hbar} \frac{\partial \tilde{\varepsilon}}{\partial \mathbf{k}} \times \mathbf{H}$$

con una banda dada por $\tilde{\varepsilon} = \varepsilon - \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{w}$.

Fin de la clase

¡Muchas gracias!