Estructura de la Materia 2

Segundo cuatrimestre de 2024

Guía 5. Dinámica de electrones de Bloch y transporte eléctrico

1. **Oscilaciones de Bloch.**

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

   $$\varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon_0 - 2t[cos(k_x a) + cos(k_y a)],$$

   donde t es un parámetro del modelo y $\mathbf{k}$ se encuentra en la primera zona de Brillouin.

   a) Grafique la velocidad de un electrón en esta banda en la dirección $\mathbf{k} = (k_x, 0)$.

   b) En la situación anterior, considerando que no hay campos externos aplicados, ¿cómo se mueve el electrón en el espacio real? Justifique su respuesta.

   c) Si tenemos ahora un campo eléctrico $\mathbf{E} = (E_0, E_y)$, ¿cómo evoluciona $\mathbf{k}$ 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 campo $\mathbf{E}$ aplicado? Justifique.

2. **Órdenes de magnitud en oscilaciones de Bloch.**

   a) Teniendo en cuenta que el tiempo 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 arseniuro de galio (GaAs), para el que, a bajas temperaturas los tiempos de relajación pueden llegar a 30×10^{-10} s y es posible construir estructuras artificiales con celdas unidad del órden de 100Å. En este caso, ¿cuánto debe valer la intensidad del campo eléctrico para ver las oscilaciones de Bloch?.

3. **Tensor de conductividad**

   a) Partiendo de la ecuación de Boltzmann en la aproximación de tiempo de relajación, muestre que la conductividad σ_{ij} (que da la componente i de la corriente inducida por un campo eléctrico externo, es decir $j_i = \sigma_{ij} E_j$, en notación de índices y sumando sobre j) está dada por:

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

   b) Exprese σ_{ij} en términos del tensor de masa efectiva.

   c) Demuestre que, para electrones libres, se recupera la fórmula de Drude. Note que esto es una casualidad porque la física involucrada en la derivación de esta fórmula es incorrecta.

4. **Tensor de conductividad para un cristal tetragonal.** Muestre que para un cristal tetragonal el tensor de conductividad es isotrópico 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. **Conductividad en una red cuadrada con banda semillena.** Considere un metal bidimensional descripto por una red de Bravais cuadrada de constante de red a. La banda de conducción del material puede escribirse en la aproximación de enlaces fuertes según:

$$E = E_0 + E_1(2 - cos(k_x a) - cos(k_y a)),$$

donde E_0 y E_1 son parámetros del problema, y puede considerar que el tiempo de relajación, τ, es independiente de $\mathbf{k}$. Si la banda estuviera semillena:

a) Calcule el tensor de conductividad. Sugerencia: parametrice la línea de Fermi y use el hecho de que la banda está semillena, teniendo en cuenta la simetría del cristal.

b) Compare el resultado con la conductividad obtenida mediante la fórmula de Drude. Use para eso 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 son diferentes.

c) (Opcional). Calcule numéricamente la conductividad en función de la densidad electrónica, y muestre que la fórmula de Drude solo es válida para una banda casi vacíía o casi llena. Explique por qué sucede esto.