

# Física de Semiconductores

## Lección 4

# Preguntas sin respuesta

- De dónde viene la constante  $\epsilon_{\infty}$  que debemos agregar en el modelo de Drude para que la función dieléctrica esté de acuerdo con los datos experimentales?
- Por qué el modelo de Drude, cuando funciona, exige una masa efectiva distinta a la masa del electrón?
- Por qué usamos un modelo de electrones libres en el caso de las propiedades ópticas o el QHE cuando sabemos que los electrones están en un cristal?

# The mother of all hamiltonians

$i$  electrons       $I$  nuclei

$$H = \sum_i \frac{p_i^2}{2m_e} + \sum_I \frac{P_I^2}{2M_I} + \frac{1}{2} \sum_{I \neq J} V_{nuc}(\mathbf{R}_I - \mathbf{R}_J) + \sum_{i,J} V_{el-nuc}(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_J) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}$$

Assume core electrons unaffected, freeze the ions:

$i$  valence electrons       $I$  ions

$$H = \sum_i \frac{p_i^2}{2m_e} + \sum_{i,J} V_{el-ion}(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_J^0) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}$$

# Más aproximaciones

- Cada electrón ve un potencial promedio.
- El potencial promedio tiene la periodicidad del cristal.
- La función de onda es un determinante de Slater de funciones de un electrón soluciones del Hamiltoniano

$$H = \frac{p^2}{2m} + V_{\text{eff}}(\mathbf{r})$$

- donde  $V_{\text{eff}}(\mathbf{r})$  tiene la periodicidad del cristal

# El potencial efectivo $V_{\text{eff}}$

- Para calcularlo debemos partir del hamiltoniano original y justificar todas las aproximaciones. Density functional theory, etc.
- Pero podemos adoptar una postura práctica y/o cínica. Como la solución propuesta satisface las simetrías básicas del problema, podemos fitear  $V_{\text{eff}}$  a datos experimentales y esperar que así podamos explicar otros datos experimentales.

# Periodicity

- Un sistema es periódico si existen 3 vectores no colineales y no coplanares  $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$  tales que el conjunto de vectores

$$\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$$

- donde los  $\{n_1, n_2, n_3\}$  son el conjunto de los enteros, conectan puntos que son físicamente equivalentes.
- El conjunto  $\{\mathbf{R}\}$  se llama red de Bravais.

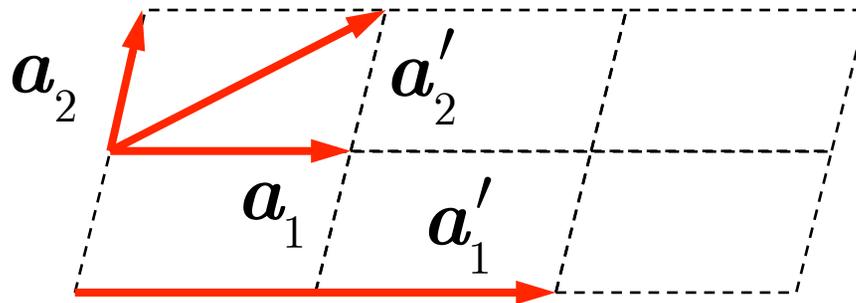
Recomendado: <http://www.xtal.iqfr.csic.es/Cristalografia/>

# Grupo de traslación

- **Clausura:**  $R_1 + R_2$  también es un vector de la red.
- **Asociativa:**  $(R_1 + R_2) + R_3 = R_1 + (R_2 + R_3)$
- **Identidad:**  $R_1 + 0 = R_1$
- **Inversa:**  $(R)^{-1} = -R$

# Vectores de base

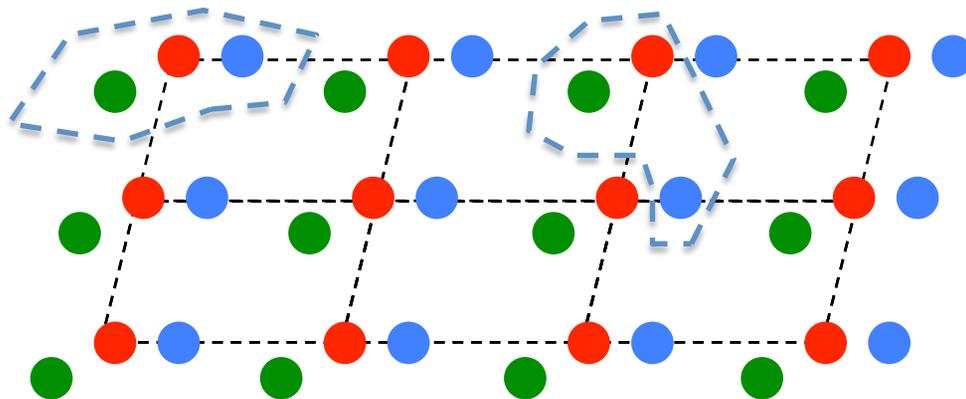
- Los vectores de base son  $(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3)$
- La base se llama **primitiva** si el conjunto
$$\{\mathbf{r}'\} \equiv \{\mathbf{r} + \mathbf{R}\}$$
- calculado para todos los  $\mathbf{T}$  posibles cubre todos los puntos físicamente equivalentes a  $\mathbf{r}$
- La base no es única:



$\mathbf{a}'_1$   
no es vector primitivo

# Cristal

- Un cristal se forma colocando una base de átomos en cada punto de una red de Bravais.
- Muchas veces el punto correspondiente a la red de Bravais coincide con la ubicación de uno de los átomos de la base, pero esto no es necesario.
- La elección de la base no es única:



# Celda unidad

- El paralelepípedo formado por los vectores primitivos forma la celda unidad.
- El volumen de la celda unidad es  $\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)$
- Hay un punto de la red de Bravais por celda unidad (8 esquinas, cada una compartida entre 8 celdas)
- Esto significa que el volumen de la celda unidad es independiente de la elección de vectores primitivos.

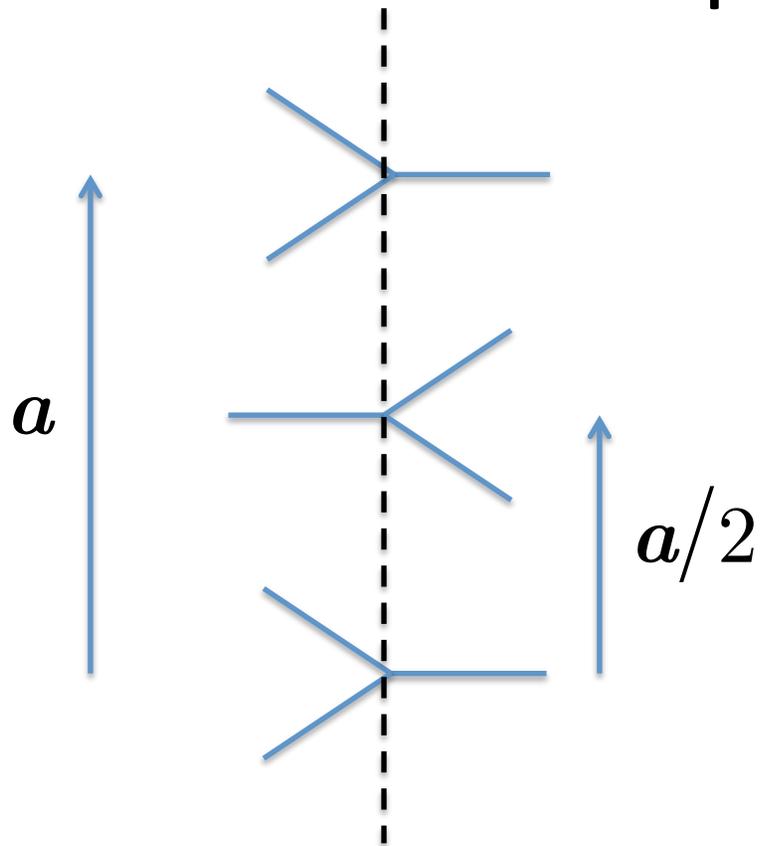
# Inversión

- Una red de Bravais siempre tiene simetría de inversión, porque para cualquier  $R$  permitido,  $-R$  también lo es.
- En un cristal, cada átomo está en un centro de inversión para los átomos de su “propia” red de Bravais.

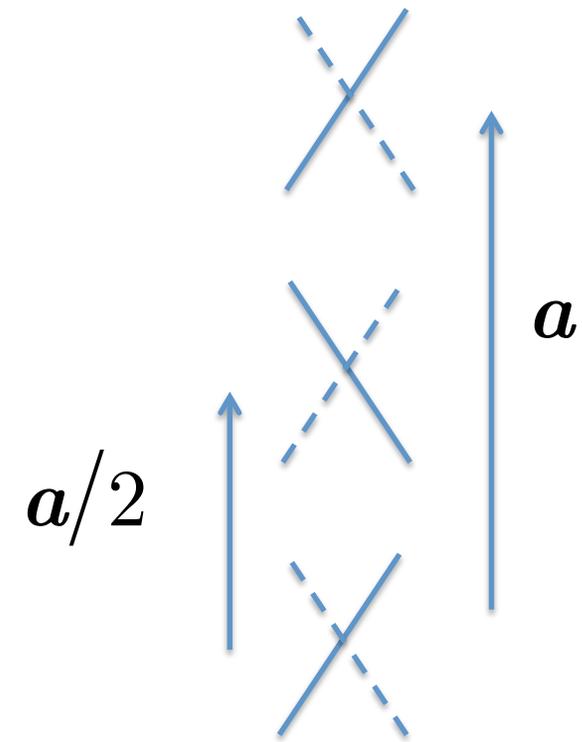
# Simetrías de punto

- Sea  $\mathcal{R}$  una matriz tal que si  $r' = \mathcal{R}r$  entonces los puntos  $r'$  y  $r$  son equivalentes.
- Entonces la matriz representa una operación de simetría. Por ejemplo, rotaciones, reflexiones, y la inversión.
- Las operaciones de simetría puntual forman un grupo que es un subgrupo de las operaciones de simetría puntual de la red de Bravais

# Ejes helicoidales y planos de desplazamiento

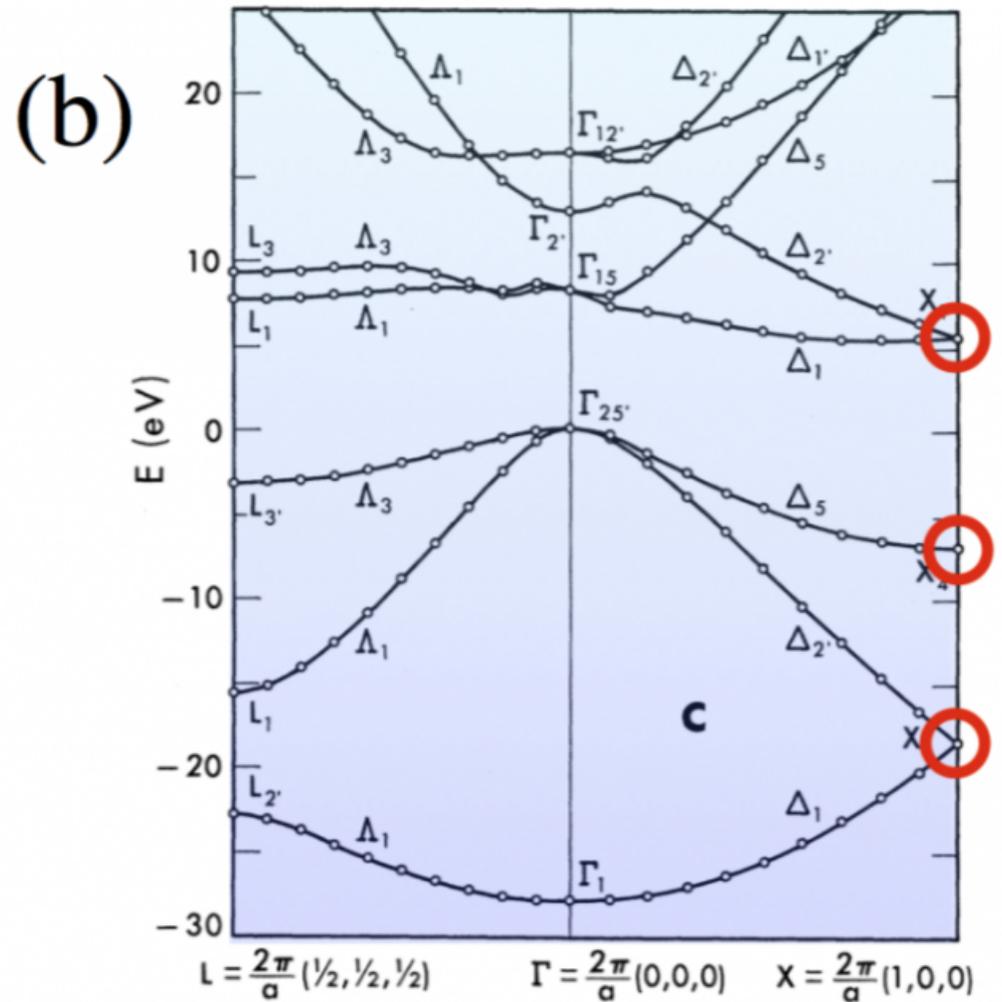
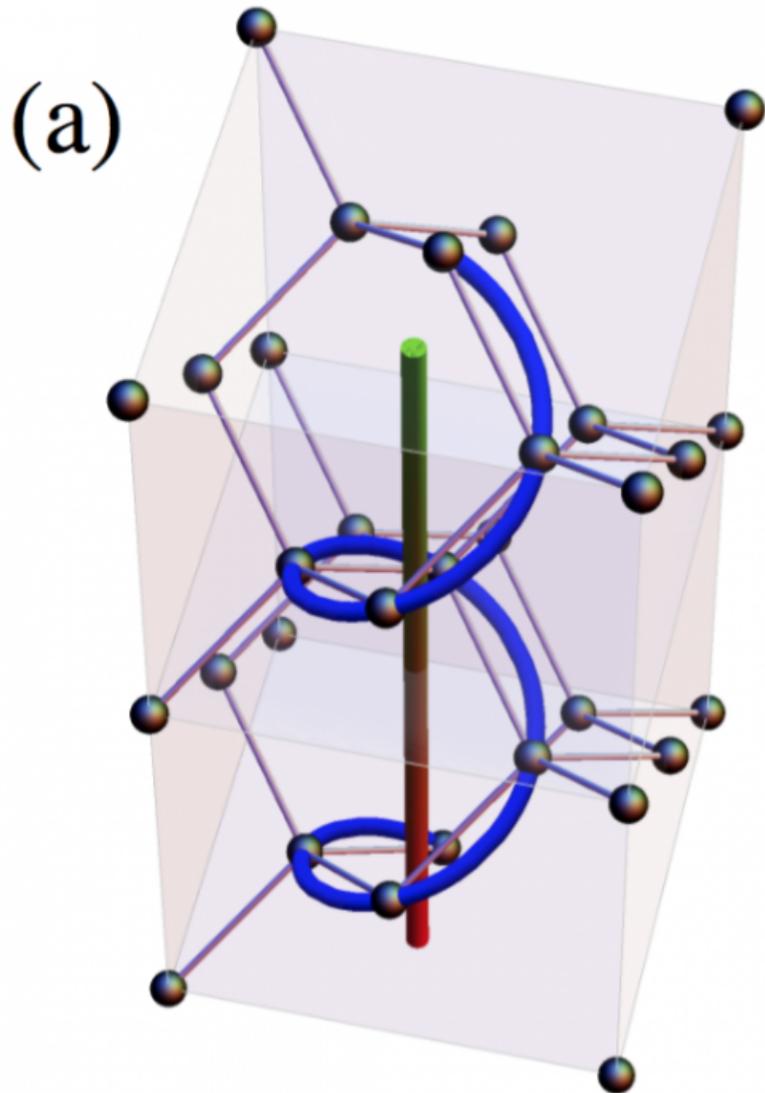


rotate  $60^\circ$  then  
translate  $a/2$



reflect, then  
translate  $a/2$

# Diamond structure screw axis



# Operador de traslación

Definimos  $T_R$  como un operador que “agrega”  $R$  a toda función de posición:

$$T_R f(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r} + \mathbf{R})$$

- Es fácil ver por expansión de Taylor, que

$$e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{R}/\hbar} f(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r} + \mathbf{R})$$

- O sea que

$$T_R = e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{R}/\hbar}$$

# Hamiltoniano conmuta con $T$ (I)

- El hamiltoniano del solido es

$$H = \frac{p^2}{2m} + V_{\text{eff}}(\mathbf{r}) \equiv \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \quad V(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = V(\mathbf{r})$$

- Obviamente  $T_R$  conmuta con  $V$ :

$$\begin{aligned} T_R V(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) &= V(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \\ &= V(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = V(\mathbf{r}) T_R \psi(\mathbf{r}) \end{aligned}$$

# Hamiltoniano conmuta con $T$ (II)

- Pero como  $\hat{T}_R = e^{i\hat{p}\cdot R/\hbar}$ , el operador de traslación también conmuta con la energía cinética  $p^2/m$

- De modo que el hamiltoniano completo conmuta con  $T$

$$T_R H = H T_R$$

- O sea que si encontramos los autoestados de  $T$ , también serán autoestados de  $H$ .

# Autoestados de $T$ (I)

- Si  $|0\rangle$  es un autoestado de  $T$  entonces

$$T_{R_1} |0\rangle = C_{R_1} |0\rangle$$

$$T_{R_2} |0\rangle = C_{R_2} |0\rangle$$

$$T_{R_1+R_2} |0\rangle = C_{R_1+R_2} |0\rangle$$

- Esto significa

$$C_{R_1+R_2} = C_{R_1} C_{R_2}$$

- y además, por la unitariedad

$$\left| C_{R_1+R_2} \right|^2 = \left| C_{R_1} \right|^2 = \left| C_{R_2} \right|^2 = 1$$

# Autoestados de $T$ (II)

- La solución es  $C_{\mathbf{R}} = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}$
- donde  $\mathbf{k}$  es un vector tridimensional que no depende de  $\mathbf{R}$ .
- Entonces podemos escribir las soluciones del hamiltoniano como

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

# Parte periódica

- Definimos

$$\begin{aligned} T_{\mathbf{R}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &= u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r} + \mathbf{R})} \\ &= \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r} + \mathbf{R})} = \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \end{aligned}$$

O sea que  $u$  es periódica. Escribimos entonces el teorema de Bloch como

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$$

# Red recíproca I

- Si un vector  $\mathbf{K}$  satisface  $\mathbf{K} \cdot \mathbf{R} = 2\pi m$  para todo  $\mathbf{R}$ , entonces

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \psi_{\mathbf{k}+\mathbf{K}}(\mathbf{r})$$

- Calculamos pues los  $\mathbf{K}$  para los cuales esto ocurre. Definimos vectores

$$\mathbf{b}_i = \frac{2\pi}{v_c} \mathbf{a}_j \times \mathbf{a}_k = 2\pi \frac{\mathbf{a}_j \times \mathbf{a}_k}{\mathbf{a}_i \cdot (\mathbf{a}_j \times \mathbf{a}_k)}$$

# Red recíproca II

- Consideremos  $\mathbf{K} = m_1 \mathbf{b}_1 + m_2 \mathbf{b}_2 + m_3 \mathbf{b}_3$
- Entonces

$$\begin{aligned} \mathbf{K} \cdot \mathbf{R} &= (m_1 \mathbf{b}_1 + m_2 \mathbf{b}_2 + m_3 \mathbf{b}_3) \cdot (n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3) \\ &= m_1 n_1 \mathbf{b}_1 \cdot \mathbf{a}_1 + m_2 n_2 \mathbf{b}_2 \cdot \mathbf{a}_2 + m_3 n_3 \mathbf{b}_3 \cdot \mathbf{a}_3 \\ &= 2\pi (m_1 n_1 + m_2 n_2 + m_3 n_3) = 2\pi (\text{entero}) \end{aligned}$$

- O sea que todos los  $\mathbf{K}$  pueden escribirse de esta forma.

# Condiciones de contorno periódicas

- Elejimos 
$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \begin{cases} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + N_1 \mathbf{a}_1) \\ \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + N_2 \mathbf{a}_2) \\ \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + N_3 \mathbf{a}_3) \end{cases}$$

- donde  $N = N_1 N_2 N_3$  es el número de celdas unidad en el cristal. Entonces

- $$e^{i\mathbf{k} \cdot N_1 \mathbf{a}_1} = e^{i\mathbf{k} \cdot N_2 \mathbf{a}_2} = e^{i\mathbf{k} \cdot N_3 \mathbf{a}_3} = 1$$

# El vector de onda

- Escribimos  $\mathbf{k} = \lambda\mathbf{b}_1 + \mu\mathbf{b}_2 + \nu\mathbf{b}_3$
- Entonces, con  $h_1$  entero,

$$\mathbf{k}N_1\mathbf{a}_1 = \lambda N_1\mathbf{b}_1 \cdot \mathbf{a}_1 = \lambda N_1 2\pi = 2\pi h_1$$

- o sea

$$\mathbf{k} = \frac{h_1}{N_1}\mathbf{b}_1 + \frac{h_2}{N_2}\mathbf{b}_2 + \frac{h_3}{N_3}\mathbf{b}_3$$

- Si no queremos repetir soluciones,  $0 \leq h_i < N_i$