



UNIVERSIDAD
COMPLUTENSE
MADRID

2.- DINÁMICA DE ELECTRONES

FÍSICA DEL ESTADO SÓLIDO II

2. Dinámica de Electrones

- Dinámica de Electrones, modelo semiclásico.
- Masa efectiva para huecos y electrones.
- Frecuencia de Ciclotrón y Efecto Hall
- Superficies de Fermi.

Dinámica Semiclásica

	Sommerfeld (Electrones libres)	Bloch (Electr. en potencial periódico)
n°s cuánticos (sin spin)	\vec{k}	\vec{k}, n
Rango	Todo el espacio	$\vec{k} \in 1\text{ZB}, n \in \mathbb{Z}$
Energía	$E_k = \hbar^2 k^2 / 2m$	$E_{n,k+G} = E_{n,k}$
Velocidad	$\vec{v} = (1/\hbar) \nabla_k E_k$	$\vec{v} = (1/\hbar) \nabla_k E_{n,k}$
Funciones de onda	$\psi_k(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$	$\psi_{n,k}(\vec{r}) = u_{n,k}(\vec{r}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$ $u_{n,k}(\vec{r} + \vec{R}) = u_{n,k}(\vec{r})$
Dinámica semiclásica	$\frac{d\vec{r}}{dt} = \hbar \frac{\vec{k}}{m}$ $\hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = -e(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B})$?

Dinámica Semiclásica

\vec{k} y \vec{r} representan el momento y la posición medios alrededor de los cuales el paquete de ondas está localizado. Todo ello limitado por el principio de incertidumbre.

La velocidad de un electrón en un cristal viene dada por la velocidad de grupo del paquete de ondas de Bloch.

$$\vec{v}_k = (1/\hbar) \nabla_k E_k$$

El modelo semiclásico predice cómo evolucionarán \vec{k} y \vec{r} en presencia de campos eléctricos y magnéticos utilizando la ecuación del movimiento:

$$\hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = -e(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B})$$

Dinámica Semiclásica

Suponemos conocida la estructura de bandas del cristal para poder obtener información de las propiedades de transporte:

- Las bandas de energía tienen mínimos y máximos en el centro y bordes de la Z.B.
- En los mínimos y máximos las bandas son aproximadamente parabólicas.

RECORDAR que $\hbar\vec{k}$ es el **momento cristalino** y no el momento del electrón.

Dinámica Semiclásica

Los electrones siguen la distribución de Fermi-Dirac para ocupar los estados permitidos.

Si suponemos que los campos externos aplicados \vec{E} y \vec{H} no son excesivamente intensos, no producirán transiciones entre bandas por lo que el índice de banda será una constante del movimiento y el número de electrones en cada banda será una constante.

Dado que cada banda es distinta, las propiedades de cada banda serán distintas. En equilibrio, o cerca de él, las bandas con energías mayores en $k_B T$ que la E_F estarán vacías. Por tanto, sólo se considerarán unos pocos niveles para describir las propiedades de transporte.

Dinámica Semiclásica

Una banda se considera llena cuando todos los niveles de energía están por debajo de la Energía de Fermi. Una banda llena no contribuye a las propiedades de transporte.

Un sólido con todas las bandas llenas o vacías será un aislante térmico (sin considerar los fonones) y eléctrico.

CONSECUENCIAS:

Como el número de niveles en cada banda es justo 2 veces el número de celdas primitivas si tenemos en cuenta el spin (spin \uparrow y spin \downarrow), sólo los sólidos con un número par de electrones por celda primitiva llenarán las bandas.

Lo inverso no es cierto: sólidos con un número par de electrones pueden ser conductores si hay solapamiento de bandas de energía.

Dinámica Semiclásica

Una banda se considera llena cuando todos los niveles de energía están por debajo de la Energía de Fermi. Una banda llena no contribuye a las propiedades de transporte.

Un sólido con todas las bandas llenas o vacías será un aislante térmico (sin considerar los fonones) y eléctrico.

CONSECUENCIAS:

Como el número de niveles en cada banda es justo 2 veces el número de celdas primitivas si tenemos en cuenta el spin (spin \uparrow y spin \downarrow), sólo los sólidos con un número par de electrones por celda primitiva llenarán las bandas.

Lo inverso no es cierto: sólidos con un número par de electrones pueden ser conductores si hay solapamiento de bandas de energía.

Dinámica Semiclásica

Describe como evolucionan la posición \vec{r} y el momento \vec{k} de un electrón de la banda n en presencia de campos externos y en ausencia de colisiones.

(nos referimos a un **paquete de ondas** construido con estados de la banda n)

1. El índice de banda es una constante de movimiento (∇ transiciones entre bandas)
2. El vector de onda de un e^- está definido salvo la adición de un vector de la red recíproca \vec{G} : n, \vec{r}, \vec{k} y $n, \vec{r}, \vec{k} + \vec{G}$ describen el mismo electrón \Rightarrow todos los vectores \vec{k} de una banda están en la primera zona de Brillouin (ZB), la celda primitiva de la red recíproca.
3. Ecuaciones de movimiento semiclásicas:

$$\vec{v}_k = (1/\hbar) \nabla_k E_k$$
$$\hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = -e(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B})$$

Dinámica Semiclásica

En una estructura de bandas de un sólido, la energía cumple $E_n(\vec{k}) = E_n(-\vec{k})$ y la velocidad $\vec{v}_n(\vec{k}) = -\vec{v}_n(-\vec{k})$.

Debe cumplirse que :

$$0 = \int_{ZB} \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} \vec{v}_n(\vec{k}) = \int_{ocup} \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} \vec{v}_n(\vec{k}) + \int_{vac} \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} \vec{v}_n(\vec{k})$$

$$\vec{J}_n = 2(-e) \int_{ZB} \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} \vec{v}_n(\vec{k}) \Rightarrow$$

$$\vec{J}_n = -e \int_{ocup} 2 \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} \vec{v}_n(\vec{k}) = +e \int_{vac} 2 \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} \vec{v}_n(\vec{k})$$

Dinámica Semiclásica

$$\vec{J}_n = -e \int_{ocup} 2 \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} \vec{v}_n(\vec{k}) = +e \int_{vac} 2 \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} \vec{v}_n(\vec{k})$$

La corriente producida ocupando con electrones un conjunto específico de niveles es la misma que la corriente que se produciría si:

- Ese conjunto de niveles no está ocupado y
- Ocupamos todos los otros niveles de la banda con partículas de carga **+e**

Los huecos se comportan dinámicamente como partículas cargadas de carga positiva con una masa efectiva m^* , ¿cuál sería esta masa efectiva?

Dinámica Semiclásica

$$\vec{k}_0 \text{ mínimo energía: } E(\vec{k}) = E(\vec{k}_0) + A|\vec{k} - \vec{k}_0|^2 = E(\vec{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2m^*} |\vec{k} - \vec{k}_0|^2$$

$$\vec{k}_0 \text{ máximo energía: } E(\vec{k}) = E(\vec{k}_0) - A|\vec{k} - \vec{k}_0|^2 = E(\vec{k}_0) - \frac{\hbar^2}{2m^*} |\vec{k} - \vec{k}_0|^2$$

$$\vec{k}_0 \text{ mínimo: } \vec{v}(\vec{k}) = +\frac{\hbar(\vec{k} - \vec{k}_0)}{m^*} \Rightarrow \dot{\vec{v}}(\vec{k}) = +\frac{\hbar}{m^*} \dot{\vec{k}} = -\frac{e}{m^*} \vec{E} \text{ (electrones)}$$

$$\vec{k}_0 \text{ maximo: } \vec{v}(\vec{k}) = -\frac{\hbar(\vec{k} - \vec{k}_0)}{m^*} \Rightarrow \dot{\vec{v}}(\vec{k}) = -\frac{\hbar}{m^*} \dot{\vec{k}} = +\frac{e}{m^*} \vec{E} \text{ (huecos)}$$

En general:

$$\dot{\vec{v}}(\vec{k}) = -\frac{e}{m^*} \vec{E} \text{ con } \frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(\vec{k})}{\partial k_i \partial k_j}$$

Dinámica Semiclásica

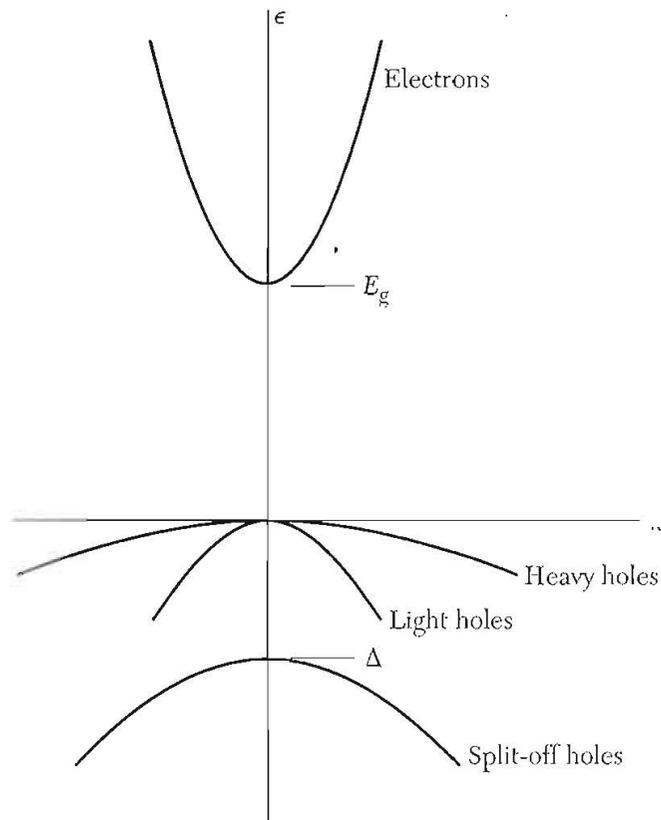


Table 2 Effective masses of electrons and holes in direct gap semiconductors

Crystal	Electron m_e/m	Heavy hole m_{hh}/m	Light hole m_{lh}/m	Split-off hole m_{soh}/m	Spin-orbit Δ , eV
InSb	0.015	0.39	0.021	(0.11)	0.82
InAs	0.026	0.41	0.025	0.08	0.43
InP	0.073	0.4	(0.078)	(0.15)	0.11
GaSb	0.047	0.3	0.06	(0.14)	0.80
GaAs	0.066	0.5	0.082	0.17	0.34
Cu ₂ O	0.99	—	0.58	0.69	0.13

El valor de la masa efectiva depende de la curvatura de las bandas

APROXIMACIÓN DE MASA EFECTIVA:

Cuando las bandas son parabólicas (cerca de los máximos y mínimos) la masa efectiva es constante.

Dinámica Semiclásica

Cuando un e^- se aproxima a un plano de Bragg el campo eléctrico lo mueve hacia niveles en los que cada vez es más probable que sea reflejado en la dirección opuesta (justo en el borde de zona las ondas se convierten en estacionarias !).

⇒ Oscilaciones de Bloch: Un campo \vec{E} continuo induciría una corriente alterna !!

¿por qué no se observan normalmente estas oscilaciones?

Lo evitan las COLISIONES: Para valores típicos del tiempo de relajación τ (tiempo medio entre colisiones) el e^- modifica su \vec{k} en una fracción muy pequeña de las dimensiones de la Zona de Brillouin (ZB).

$$|\vec{E}| \sim 10^{-2} \text{ V/cm}; \tau \sim 10^{-14} \text{ s} \implies \frac{e|\vec{E}|\tau}{\hbar} \sim \frac{1}{10} \text{ cm}^{-1}$$

Y las dimensiones típicas de ZB $\sim 1/a \sim 10^8 \text{ cm}^{-1}$

Dinámica Semiclásica

Dispersión de electrones de Bloch.

- El problema de las colisiones. Los conductores normales presentan resistencia eléctrica.
- En una red periódica perfecta no hay procesos de dispersión o colisiones. Las ondas de Bloch se propagarían sin perturbar.

En la aproximación de un electrón, hay dos fuentes de dispersión:

- **ELÁSTICA:** defectos de la red, fijos en espacio y tiempo
- **INELÁSTICA:** vibraciones de la red, varían con el tiempo

También pueden darse las **colisiones electrón-electrón**

Dinámica Semiclásica

CONDUCTIVIDAD ELÉCTRICA:

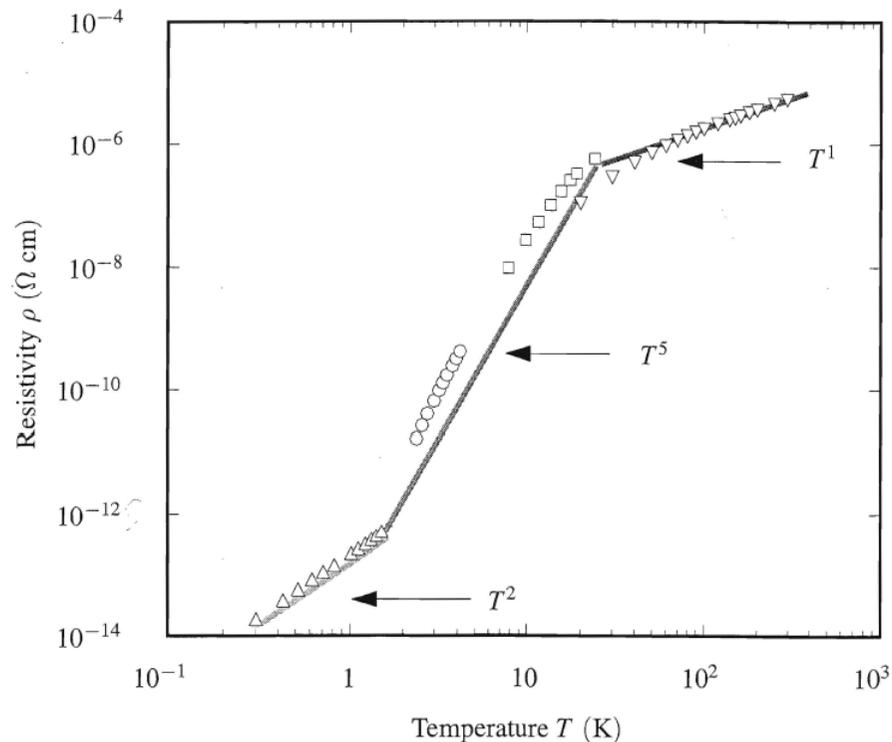


Figure 18.1. Resistivity of potassium from 0.1 to 300 K. At the lowest temperatures, the resistance varies as T^2 , from 2 to 20 K, it varies as T^5 , and from 100 K upwards, it varies as T^1 . [Source: Bass et al. (1990).]

¿Cuáles son los mecanismos Dominantes?

$T \gg$: Dominan los fonones de energía máxima ($\rho \sim T$)

T intermedia : Dominan los fonones de baja energía ($\rho \sim T^5$) (Hay desviaciones en muchos materiales)

$T \ll$: Defectos ($\rho \sim \text{cte.}$) e interacciones elect.- electr. ($\rho \sim T^2$), sólo se observa si la concentración de defectos es baja.

Dinámica Semiclásica

CONDUCTIVIDAD ELÉCTRICA:

$$\rho(T) = \frac{1}{\sigma} = \frac{m^*}{ne^2} \frac{1}{\tau}$$

τ contiene toda la dependencia en T

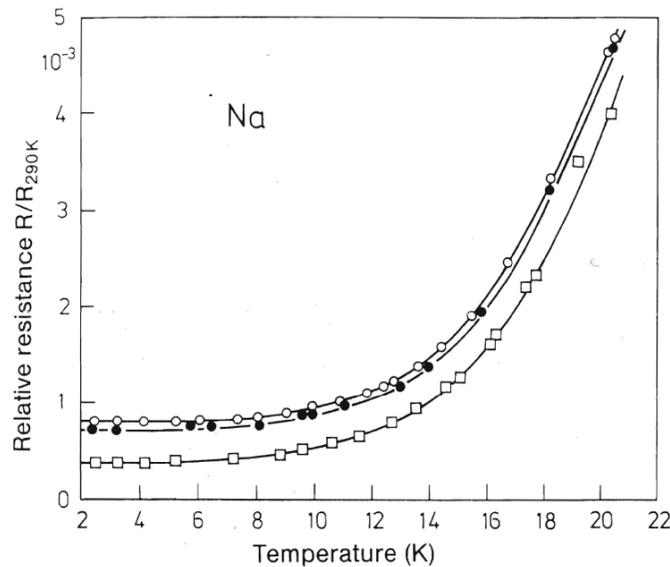
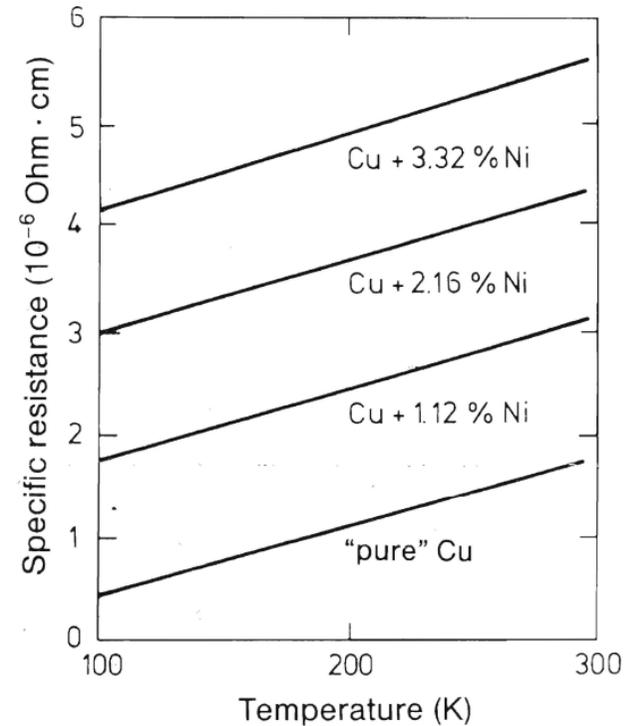
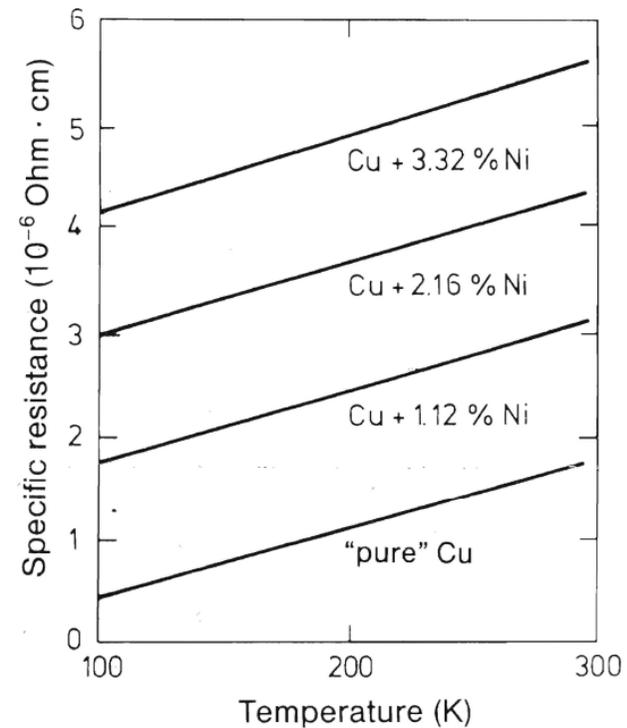
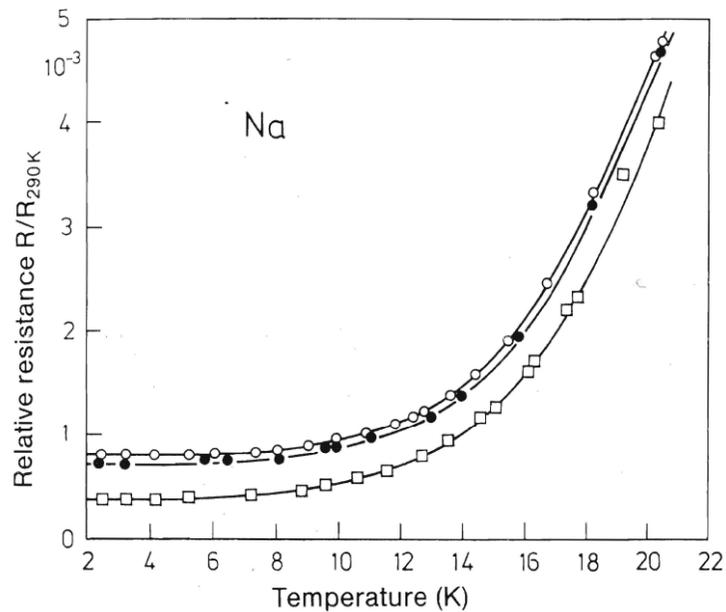


Fig. 9.6. Electrical resistance of sodium compared to the value at 290 K as a function of temperature. The data points (\circ , \bullet , \square) were measured for three different samples with differing defect concentrations. (After [9.3])



Dinámica Semiclásica

Defectos: vacantes, impurezas (substitucionales o intersticiales), son centros de dispersión localizados y distribuidos al azar por el cristal \Rightarrow **Dispersión elástica (conserva la energía) e independiente de T.**



Dinámica Semiclásica

COLISIÓN ELECTRÓN-ELECTRÓN : Se conserva la energía y el momento

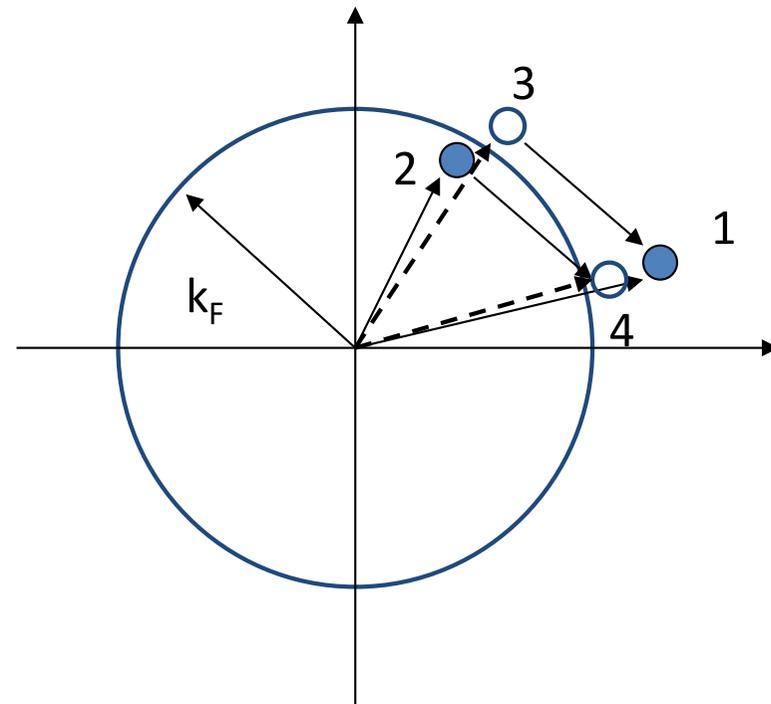
$$E_1 + E_2 = E_3 + E_4$$

$$\vec{k}_1 + \vec{k}_2 = \vec{k}_3 + \vec{k}_4 + \vec{G}$$

$$\begin{matrix} E_1 > E_F \\ E_2 < E_F \end{matrix} \Rightarrow \begin{matrix} E_3 > E_F \\ E_4 > E_F \end{matrix}$$

$$E_1 + E_2 = E_3 + E_4 > 2E_F$$

$$\vec{k}_1 - \vec{k}_3 = \vec{k}_4 - \vec{k}_2$$



A temperaturas de 1K la probabilidad de dispersión e-e es un factor 10^{-10} veces más pequeña que la dispersión e-defecto.

Dinámica Semiclásica

COLISIÓN ELECTRÓN-ELECTRÓN : Se conserva la energía y el momento

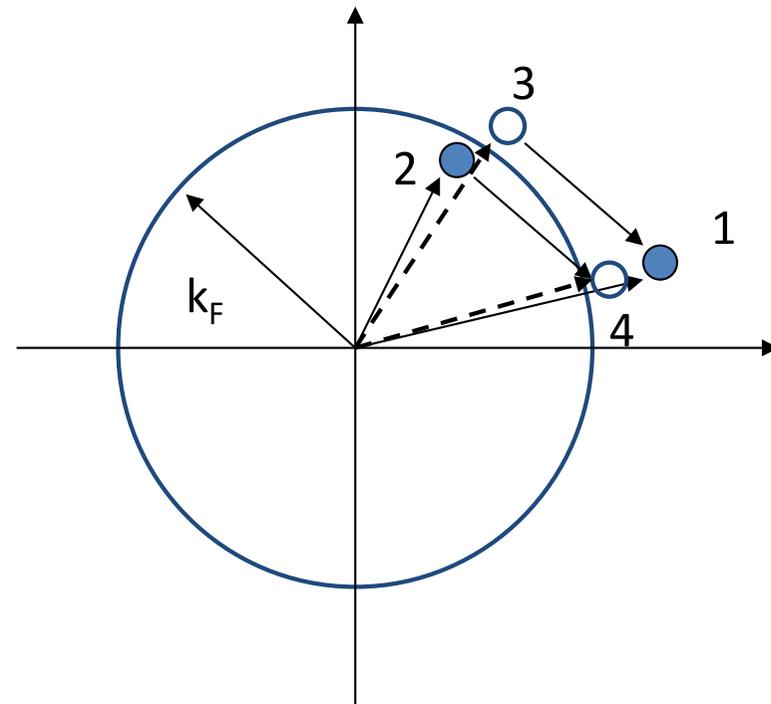
$$E_1 + E_2 = E_3 + E_4$$

$$\vec{k}_1 + \vec{k}_2 = \vec{k}_3 + \vec{k}_4 + \vec{G}$$

$$\begin{matrix} E_1 > E_F \\ E_2 < E_F \end{matrix} \Rightarrow \begin{matrix} E_3 > E_F \\ E_4 > E_F \end{matrix}$$

$$E_1 + E_2 = E_3 + E_4 > 2E_F$$

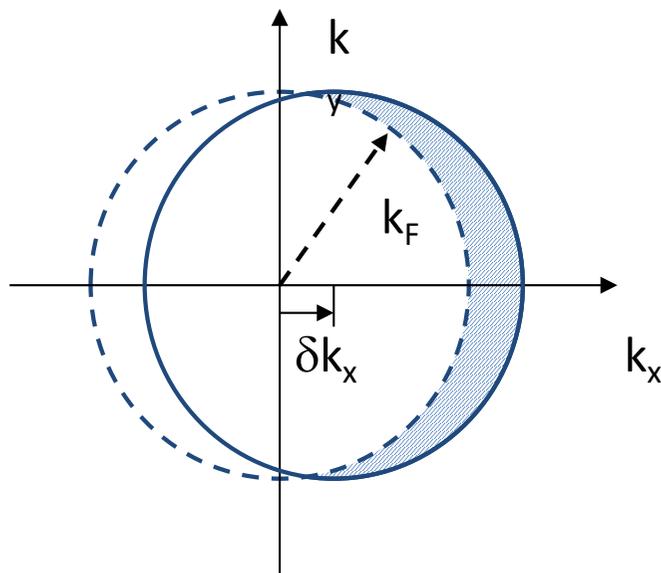
$$\vec{k}_1 - \vec{k}_3 = \vec{k}_4 - \vec{k}_2$$



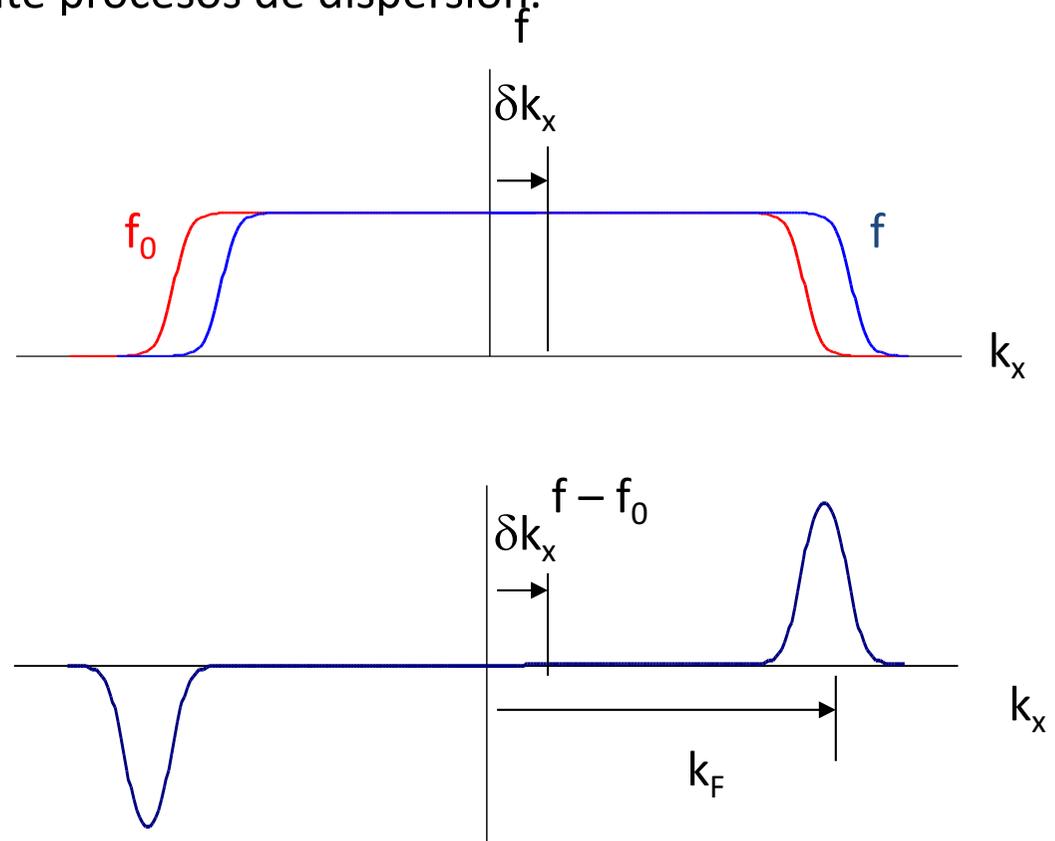
A temperaturas de 1K la probabilidad de dispersión e-e es un factor 10^{-10} veces más pequeña que la dispersión e-defecto.

Dinámica Semiclásica

Aproximación del tiempo de relajación: Un sistema que se encuentra fuera del equilibrio, vuelve al equilibrio mediante procesos de dispersión.

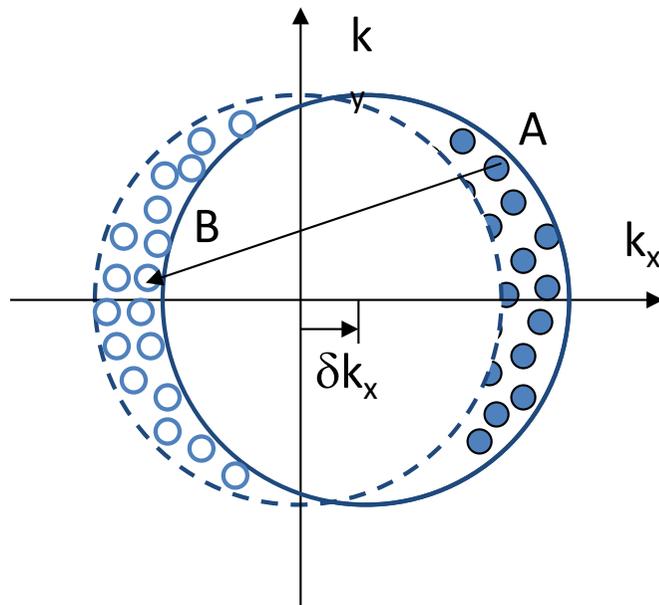


La nueva distribución sólo se diferencia de la situación de equilibrio alrededor del nivel de Fermi

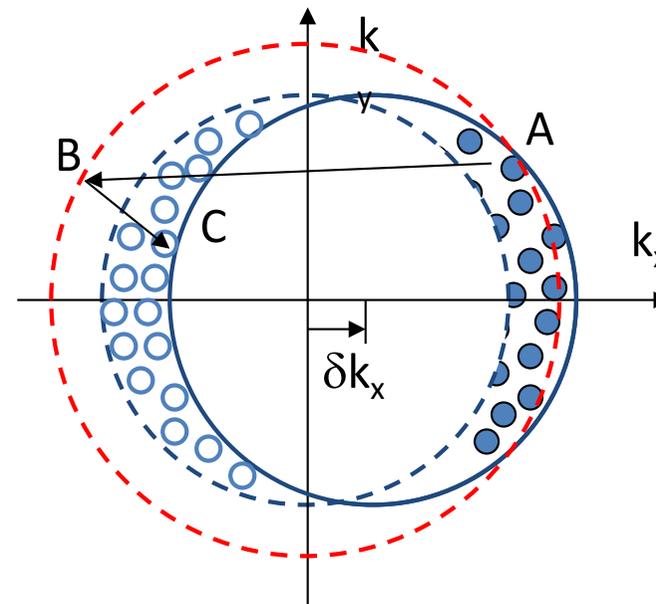


Dinámica Semiclásica

Paso de una situación estacionaria de no equilibrio (esfera A) a una situación de equilibrio (esfera B)



Necesidad de dispersión inelástica para volver al equilibrio: interacción con fonones.
 $E_A \neq E_B$



Dispersión elástica: $E_A = E_B$
Además hace falta dispersión inelástica para llegar a E_C

Dinámica Semiclásica

¿Cómo se combinan estos mecanismos? . **REGLA DE MATTHIESEN**

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_1} + \frac{1}{\tau_2} + \frac{1}{\tau_3} + \dots$$

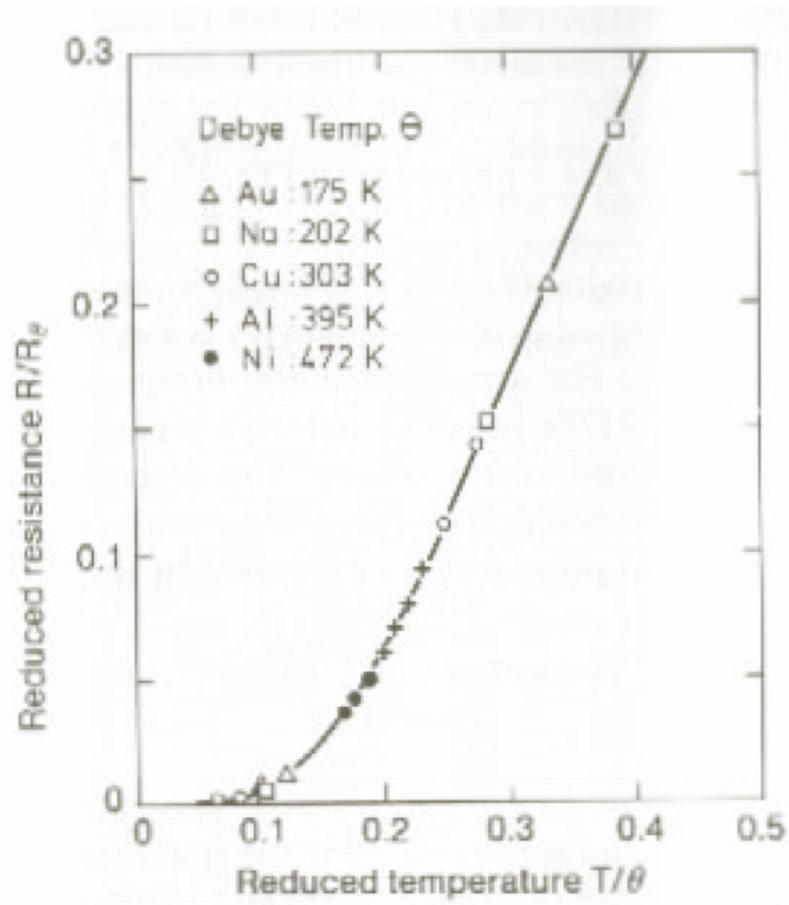
donde los τ_j son los tiempos de relajación para cada uno de los diferentes procesos de dispersión (scattering) (dispersión por defectos, emisión y absorción de fonones, etc)

El mecanismo de dispersión con τ_j más pequeño es el que domina, por lo que podemos identificar regiones de temperatura en la que uno de los mecanismos es el dominante y olvidarnos del resto.

¿Cuando falla esta aproximación?

- ▶ El resultado de un proceso de dispersion influye en el resultado de otro.
- ▶ Uno o mas de los τ_j depende fuertemente de $\bar{\mathbf{k}}$.

Dinámica Semiclásica



CURVA UNIVERSAL DE GRÜNEISEN

R/R_0 en función de T/Q , donde Q es la temperatura de Debye



UNIVERSIDAD
COMPLUTENSE
MADRID

DINÁMICA SEMICLÁSICA