Estructura de la materia 2

Segundo cuatrimestre de 2018

Guía 9: dinámica de electrones de Bloch y transporte

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

   $\epsilon(\vec{k}) = \epsilon_0 - 2t[\cos(k_x a) + \cos(k_y a)]$

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

   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.

   d) Calcule el tensor de masa efectiva.

   e) En esta banda, ¿la aceleración del electrón es paralela al $\vec{E}$ aplicado? Justifique.

2. (a) Teniendo en cuenta que el campo 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 sistema GaAs, donde a bajas temperaturas los tiempos de relajación pueden llegar a 3×10^{-10} s y es posible construir estructuras artificiales con celdas unidad del orden de 100 Å. En este caso, cuánto debe valer la intensidad del campo eléctrico para ver las oscilaciones de Bloch?

3. (a) Partiendo de la ecuación de Boltzmann en la aproximación de tiempo de relajación, muestre que la conductividad σ_{ij} (que da la corriente inducida por un campo eléctrico externo: $j_i = \sigma_{ij} E_j$; suma sobre j) está dada por:

$$\sigma_{ij} = e^2 \int \frac{d\vec{k}}{4\pi^3} \tau(\vec{k}) v_i(\vec{k}) v_j(\vec{k}) \left(-\frac{\partial f}{\partial \epsilon} \right)\Big|_{\epsilon(\vec{k})} \qquad (1)$$

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

   (c) Demuestre que para electrones libres se recupera la fórmula de Drude (NOTA: recuerde que esto es una *casualidad*, porque la física involucrada en la deducción de esta formula es incorrecta).

4. Demostrar que para un cristal tetragonal la conductividad es isotrópica 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. Considere un metal bidimensional con una red de Bravais cuadrada de constante de red a. La banda de conducción está dada en la aproximación de enlaces fuertes por:

$$E = E_0 + E_1(2 - \cos(k_x a) - \cos(k_y a)) \tag{2}$$

y el tiempo de relajación τ es independiente de $\vec{k}$. La banda está semillena.

(a) Calcule el tensor de conductividad (parametrice la línea de Fermi, use el hecho de que la banda está semillena y la simetría del cristal).

(b) Compare el resultado de (a) con la conductividad que obtiene mediante la fórmula de Drude. Para esto, use 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 discrepan.

(c) (Opcional) Calcule numéricamente la conductividad en función de la densidad de electrones, y muestre que la fórmula de Drude sólo es válida para una banda casi vacía o casi llena (explique por qué sucede esto).