

# Resumen Examen "Introducción a la Física del Sólido"

Antonia Cisternas

## 1 Teoría de Bandas

- Explica la existencia de conductores, aisladores y semiconductores.
- En un átomo individual, los niveles de energía son discretos, pero cuando muchos átomos se juntan, se forman bandas de energía.
- Un electrón libre tiene un continuo de energías.

### 1.1 Origen de las bandas

- Al juntar muchos átomos, los niveles de energía se aproximan tanto que parecen un cuasicontinuo.
- Al juntar  $N$  átomos, aparecen zonas vacías llamadas *brechas de energía*.
- El razonamiento no depende del orden, solo de la aglomeración de átomos, pero el orden sí incide en la estructura de las bandas.

### 1.2 Digresión: hamiltoniano con parámetros

- El átomo hidrogenoide tiene niveles de energía discretos definidos por:

$$E_n = -Zr_y/n^2$$

donde  $Z$  es un parámetro entero.

- El oscilador armónico tiene niveles de energía discretos definidos por:

$$E_n(\omega) = \left(\frac{1}{2} + n\right) \hbar\omega$$

donde  $\omega$  es un parámetro continuo.

### 1.3 Hipótesis de la teoría de bandas

- Se buscan los estados de un electrón (los orbitales), que se llenan usando el principio de exclusión de Pauli y la estadística de Fermi-Dirac.
- Se ignoran las vibraciones de la red, suponiendo núcleos fijos, aunque en la realidad estas oscilaciones rompen la simetría.
- Los núcleos positivos forman parte del potencial  $V(x, y, z)$ .

### 1.4 Caso de cristal periódico

- El potencial es periódico:

$$V(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = V(\mathbf{r})$$

donde  $\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$  con  $n_i \in \mathbb{Z}$ .

- El Hamiltoniano conmutará con el operador de traslación  $T_{\mathbf{R}}$ :

$$[H, T_{\mathbf{R}}] = 0$$

### 1.5 Funciones de Bloch

- Si  $[H, T_{\mathbf{R}}] = 0$ , las funciones de onda tienen la forma:

$$\psi(\mathbf{r}) = u(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad u(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = u(\mathbf{r})$$

- Alternativamente:

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

**Observaciones:**

- $\hbar\mathbf{k}$  no es el momento del electrón, sino el *cuasimomento*:

$$-i\hbar\nabla\psi = \hbar\mathbf{k}\psi - i\hbar e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\nabla u(\mathbf{r}) \neq \text{cte} \cdot \psi$$

- Los estados no están localizados, y el momento lineal medio no es nulo.

### 1.6 Condiciones de contorno de Born-von Kármán

- Se imponen condiciones periódicas:

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} + N_1 \mathbf{a}_1) \Rightarrow e^{i\mathbf{k}\cdot N_1 \mathbf{a}_1} = 1$$

- Esto restringe los posibles valores de  $\mathbf{k}$ :

$$k_1 = 2n_1\pi/N_1 a_1 = 0, \pm 1, \dots, \pm N_1/2$$

$$k_2 = \dots$$

### 1.7 Valores aceptables de $\mathbf{k}$

- Si  $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{G}$ , con  $\mathbf{G}$  vector de la red recíproca, las condiciones de borde son equivalentes.
- Se eligen los  $\mathbf{k}$  dentro de la primera zona de Brillouin.

### 1.8 Consecuencias

- Si  $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{G}$ , entonces:

$$\psi' = \text{cte} \cdot \psi \Rightarrow \hat{H}\psi = \text{cte} \cdot \hat{H}\psi' \Rightarrow \epsilon(\mathbf{k}') = \epsilon(\mathbf{k})$$

- Es una periodicidad de la energía en el espacio  $\mathbf{k}$ .

### 1.9 Numeración de las soluciones de la ecuación de Schrödinger

- Para cada  $\mathbf{k}$  hay soluciones  $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$  con valores de energía  $\epsilon_n(\mathbf{k})$ .

- $n$  es el *índice de banda* y  $\mathbf{k}$  se mueve cuasicontinuuamente en la 1ª zona de Brillouin.

## 1.10 Periodicidad de la energía

$$\psi_{n,\mathbf{k}+\mathbf{G}}(\mathbf{r}) = \text{cte} \cdot \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad \epsilon_n(\mathbf{k} + \mathbf{G}) = \epsilon_n(\mathbf{k})$$

Cada banda contiene  $N = N_1 N_2 N_3$  valores de  $\mathbf{k}$  y  $2N$  estados considerando el espín.

## 1.11 Representaciones

- **Zona reducida:** se grafica  $\epsilon_n(\mathbf{k})$  en la 1ª zona de Brillouin (representación compacta).

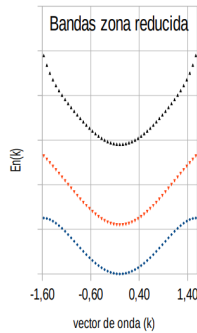


Figura 1

- **Zona extendida:** se grafica  $\epsilon_1(\mathbf{k})$  en la 1ª zona,  $\epsilon_2(\mathbf{k})$  en la 2ª, etc.

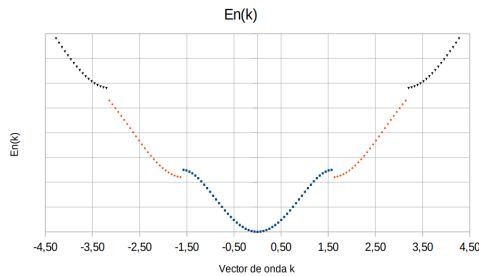


Figura 2

- **Periódica:** se grafica  $\epsilon_n(\mathbf{k})$  en todas las zonas (redundante).

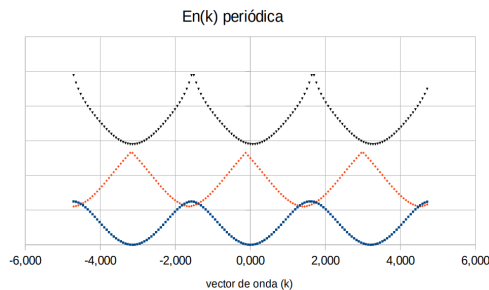


Figura 3

## 1.12 Caso de potencial muy débil

$$\epsilon_n(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad \text{con } \epsilon_n(\mathbf{k} + \mathbf{G}) = \epsilon_n(\mathbf{k})$$

## 1.13 Conducción

- Requiere que haya estados ocupados y desocupados próximos.
- En el espacio real, un campo eléctrico  $E$  ejerce una fuerza  $\mathbf{F} = -e\mathbf{E}$ .
- En el espacio  $\mathbf{k}$ , el campo cambia la energía del electrón si hay estados desocupados accesibles.

## 1.14 Conducción en bandas

- Bandas completamente vacías o llenas no conducen (salvo por excitaciones interbanda).
- Solo las bandas parcialmente llenas permiten conducción eficiente.
- La banda de valencia es la más alta ocupada, la de conducción la más baja vacía.

## 1.15 Conductores, aisladores y semiconductores

- **Conductores:** las bandas de valencia y conducción se superponen.
- **Aisladores:** existe una gran brecha de energía:

$$E_g = \epsilon_c - \epsilon_v \gg k_B T$$

- **Semiconductores:** tienen una brecha moderada; a temperatura ambiente puede haber excitación térmica de BV a BC.

## 1.16 Otras consecuencias

- En una banda hay  $2N$  estados por espín.
- Si la celda contiene un número impar de electrones  $\Rightarrow$  banda incompleta  $\Rightarrow$  conductor.
- Si el número de electrones es par, no se puede concluir sin más información.

## 1.17 ¿Quiénes son?

- **Conductores:** metales con enlace metálico y electrones deslocalizados.
- **Aisladores:** sólidos covalentes (ej. Si) o iónicos (ej. NaCl).

## 1.18 Comportamiento metálico y no metálico

- En metales, la resistividad aumenta con la temperatura debido a los fonones ya que los electrones se mueven en la banda de conducción.
- En aislantes y semiconductores, la conductividad aumenta con la temperatura y la resistividad disminuye ya que los electrones de la banda de valencia saltan a la banda de conducción.

## 1.19 Colisiones electrón-ion

- En el modelo de bandas básico no hay colisiones electrón-ion.
- El potencial  $V(\mathbf{r})$  ya contiene el efecto de los iones.
- Las colisiones responsables de la resistividad deben modelarse aparte.

	Sommerfeld	Bloch
Quantum Number	$\vec{k}$ ( $\hbar\vec{k}$ is the momentum)	$\vec{k}$ , $n$ ( $\hbar\vec{k}$ is the crystal momentum)
Range of Quantum Number	all $\vec{k}$ space consistent with PBC	For each $n$ , $\vec{k}$ runs through all vectors in a single Brillouin zone, consistent with PBC
Energy	$\varepsilon(\vec{k}) = \frac{1}{2m}\hbar^2 k^2$	No specific form. $\varepsilon_n(\vec{k}) = \varepsilon_n(\vec{k} + \vec{K})$
Velocity	$\vec{v} = \hbar\vec{k} / m = (\hbar/m)(\partial\varepsilon / \partial\vec{k})$	$\vec{v}_n(\vec{k}) = (\hbar/m)(\partial\varepsilon_n / \partial\vec{k})$
Wave Function	$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = V^{-1/2} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$	Satisfies Bloch condition.

**Figura 4:** Comparación entre niveles en equilibrio de un electrón entre el modelo de Sommerfeld y Bloch.

## 2 Bandas (potencial débil)

### 2.1 Partícula cuasi libre en red 1D

- Se considera al electrón como partícula libre en una red periódica 1D.
- Se produce reflexión de Bragg si:

$$2d \sin \theta = n\lambda = \frac{2\pi}{k} \Rightarrow k = \frac{n\pi}{d}$$

con  $d$  = constante de red y  $\theta = \pi/2$ .

- Para esos valores de  $k$ , no se pueden propagar los electrones (soluciones son ondas estacionarias): se forman brechas de energía debido a la degeneración de estados en el borde de la 1<sup>ra</sup> zona.
- Conclusión: aunque el potencial sea débil, la periodicidad crea estructura de bandas.

### 2.2 Generalización a 3D

- Se aplica la condición de Laue:

$$\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{G}$$

- La condición de Bragg se expresa como:

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{G} = \frac{G^2}{2}$$

- Los planos que cumplen esta condición forman los **planos de Bragg**.
- En torno a estos planos hay brechas de energía (bandas prohibidas).

### 2.3 Potencial periódico débil

- Consideramos  $U(x)$  periódico y débil:  $|U| \ll \hbar^2 k^2 / 2m$  (salvo si  $k \approx 0$ ).
- Hamiltoniano:

$$H\psi = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x) \right) \psi = \varepsilon\psi$$

- Si  $V = 0$ , se tiene:

$$\psi^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad \varepsilon^{(0)} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

### 2.4 Teoría de perturbaciones

- Se busca una solución como expansión:

$$\psi = \psi^{(0)} + \psi^{(1)} + \psi^{(2)} + \dots \quad \varepsilon = \varepsilon^{(0)} + \varepsilon^{(1)} + \varepsilon^{(2)} + \dots$$

- El término de primer orden es:

$$\varepsilon^{(1)} = \left\langle \psi_n^{(0)} \left| U \right| \psi_n^{(0)} \right\rangle = \bar{U}$$

- Pero se redefine el potencial para que  $\bar{U} = 0$ , eliminando la corrección de primer orden (la primera corrección a todas las energías sería simplemente sumar  $\bar{U}$  a todas. No depende de  $k$ , no cambia la física, sólo desplaza el espectro).

### 2.5 Corrección de segundo orden (no degenerada)

$$\varepsilon_n^{(2)} = \sum_{n' \neq n} \frac{\left| \left\langle \psi_{n'}^{(0)} \left| U \right| \psi_n^{(0)} \right\rangle \right|^2}{\varepsilon_n^{(0)} - \varepsilon_{n'}^{(0)}}$$

- Siempre que no haya degeneración, esta corrección es pequeña si  $U$  es pequeño.
- Las bandas tienden a *repelerse*.

### 2.6 Condición de degeneración estricta

- Se da si:

$$\varepsilon_n(k) = \varepsilon_{n'}(k) \Rightarrow \frac{\hbar^2}{2m} [(k - G_n)^2 - (k - G_{n'})^2] = 0$$

- Esto implica:

$$2k \cdot (G_{n'} - G_n) = G_{n'}^2 - G_n^2$$

que describe un plano de Bragg en el espacio- $k$ .

### 2.7 Remoción de degeneración

- Si hay degeneración (denominador nulo), la corrección de segundo orden diverge.
- Se remueve la degeneración y aparece separación de bandas:

$$\varepsilon = \varepsilon_0 \pm |U_{12}| = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \pm |\langle \psi_1 | U | \psi_2 \rangle|$$

- La elección de  $\pm$  depende de la simetría y la repulsión entre bandas.

## 2.8 Resumen conceptual

- La periodicidad del potencial crea bandas de energía, incluso si es muy débil.
- Las reflexiones de Bragg explican las brechas energéticas.
- La teoría de perturbaciones permite analizar cómo el potencial de la red modifica la estructura energética.
- Las correcciones de segundo orden introducen pequeñas desviaciones, salvo en casos degenerados donde producen apertura de brechas.

## 3 Bandas (ecuación central)

### 3.1 Planteamiento del problema

- Se considera un potencial periódico  $U(\mathbf{r})$ :

$$U(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = U(\mathbf{r}) \quad \forall \mathbf{R} \in \text{red de Bravais}$$

- Se puede expandir en serie de Fourier en términos de los vectores de la red recíproca  $\mathbf{G}$ :

$$U(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} U_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}}$$

- Sin pérdida de generalidad se puede fijar  $U_{\mathbf{G}=0} = 0$  (cambio de referencia energética).

### 3.2 Funciones de Bloch

- Las funciones de Bloch tienen la forma:

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

- Donde  $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  es periódica:

$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

- Entonces también se puede expandir como:

$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} C_{\mathbf{k}+\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}}$$

- Por tanto, la función de onda completa es:

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

### 3.3 Ecuación de Schrödinger en espacio recíproco

- Se obtiene un sistema infinito de ecuaciones acopladas para los coeficientes  $C_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}$ :

$$\sum_{\mathbf{G}'} \left[ \frac{\hbar^2}{2m} |\mathbf{k} + \mathbf{G}'|^2 \delta_{\mathbf{G},\mathbf{G}'} + U_{\mathbf{G}-\mathbf{G}'} \right] C_{\mathbf{k}+\mathbf{G}'} = \varepsilon C_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}$$

- Esta es la llamada **ecuación central de la teoría de bandas**.

### 3.4 Caso unidimensional (1D)

- Se usa la notación:

$$G_n = \frac{2\pi n}{a}, \quad k \in 1^{\text{a}} \text{ zona de Brillouin}$$

- Se reescriben los coeficientes como  $C_n = C_{k+G_n}$ , obteniendo:

$$\sum_m \left[ \frac{\hbar^2}{2m} (k + G_m)^2 \delta_{n,m} + U_{n-m} \right] C_m = \varepsilon C_n$$

- Este sistema puede representarse matricialmente:

$$\sum_m H_{n,m}(k) C_m = \varepsilon C_n$$

### 3.5 Ejemplo: potencial cosenoidal

- Para un potencial tipo:

$$U(x) = 2V_0 \cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right)$$

se tiene:

$$U_{+1} = U_{-1} = V_0, \quad U_n = 0 \text{ para } |n| > 1$$

- La matriz  $H_{n,m}$  tiene términos fuera de la diagonal sólo cuando  $|n - m| = 1$ .

### 3.6 Truncación

- Como el sistema es infinito, se aplica una **truncación**: se desprecia  $C_m$  para  $|m| > M$ .

- Por ejemplo, si  $M = 5$ , se resuelve una matriz de  $11 \times 11$ .

### 3.7 Tratamiento por perturbaciones

- Si  $V_0$  es pequeño, se puede aplicar teoría de perturbaciones:

$$\varepsilon = \varepsilon^{(0)} + \varepsilon^{(1)} + \varepsilon^{(2)} + \dots$$

- Energías no perturbadas:

$$\varepsilon_n^{(0)} = \frac{\hbar^2}{2m} (k + G_n)^2$$

$$\varepsilon_1^{(0)} = \varepsilon_2^{(0)} = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{2\pi}{a} \right)^2$$

- La corrección por acoplamiento entre dos estados degenerados:

$$\varepsilon = \varepsilon_0 \pm |U_{12}|; \quad \varepsilon_0 = \frac{\varepsilon_1^{(0)} + \varepsilon_2^{(0)}}{2}$$

- Se abre una **brecha de energía** de magnitud  $2|U_{12}|$ .

### 3.8 Visualización

- Las correcciones se evidencian como separación de bandas en los cruces degenerados.
- En representaciones gráficas aparecen discontinuidades suaves en los bordes de zona de Brillouin.
- Los efectos del potencial aparecen aun si es muy débil, debido a la periodicidad.

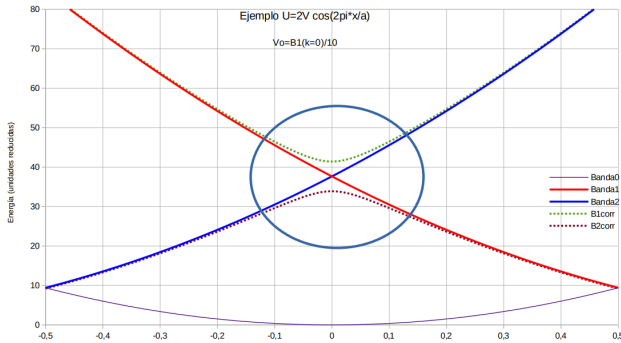


Figura 5

## 4 Bandas (Ligadura fuerte)

### 4.1 Electrón fuertemente ligado (Tight Binding)

- Se considera el sólido como átomos individuales.
- Si están muy separados, no hay intercambio de electrones.
- Al aproximarse, las funciones de onda se solapan.
- La aproximación de ligadura fuerte (tight binding) supone:
  - Las funciones de Bloch se construyen a partir de orbitales atómicos.
  - La mayor parte de los electrones está fuertemente ligada al núcleo (se ignoran).

### 4.2 Notación espectroscópica

- Orbitales hidrogenoides con números cuánticos:
  - Principal:  $n = 1, 2, \dots$
  - Momento angular:  $l = 0, 1, \dots, n - 1$
  - Magnético:  $m = -l, \dots, l$
- Denominaciones:
  - $l = 0 \rightarrow s$  (sharp)
  - $l = 1 \rightarrow p$  (principal)
  - $l = 2 \rightarrow d$  (difuse)
  - $l = 3 \rightarrow f$  (fundamental)

### 4.3 Funciones “s”

- Energías del átomo hidrogenoide:

$$E_n = -\frac{me^4 Z^2}{8\epsilon_0^2 h^2 n^2} = -\frac{Z^2 E_H}{2n^2}$$

con  $E_H \approx 27.2$  eV.

### 4.4 Bandas en semiconductores

- Al calcular la estructura de bandas en función de la separación, aparecen bandas y bandas prohibidas.
- La existencia de banda prohibida depende solo de la hibridación.

### 4.5 Aproximación LCAO

- Se usa la “Linear Combination of Atomic Orbitals” (LCAO) para aproximar funciones de Bloch. Se usan las funciones s ( $l=0$ ) para definir:

$$\psi_k(r) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{m=1}^N e^{ik \cdot ma_1} \phi(r - ma_1)$$

- Es exacta en el límite  $N \rightarrow \infty$ .

### 4.6 Cálculo de energías en el modelo de ligadura fuerte

- Si  $\psi$  es combinación lineal de  $\Phi$  (propias de  $H_{atmico}$ ) y  $H = H_{at} + H_c$ ,
- Corrección de primer orden:

$$\epsilon(k) - \epsilon_0 = \langle \psi_k | H_c | \psi_k \rangle$$

$$\epsilon(k) - \epsilon_0 = -\alpha - \gamma \sum_m e^{ik \cdot t_m}$$

### 4.7 Ejemplo: Red cúbica simple

- Con vectores a vecinos más próximos  $t_m$ :

$$(a, 0, 0), (-a, 0, 0), (0, a, 0), (0, -a, 0), (0, 0, a), (0, 0, -a)$$

- Energía de banda:

$$\epsilon(k) = \epsilon_0 - \alpha - 2\gamma[\cos(k_x a) + \cos(k_y a) + \cos(k_z a)]$$

- Mínimo en el centro ( $k = 0$ ):

$$\epsilon_{\min} = \epsilon_0 - \alpha - 6\gamma$$

- Máximo en el borde de la primera zona:

$$\epsilon_{\max} = \epsilon_0 - \alpha$$

- Expansión alrededor de  $k = 0$ :

$$\epsilon(k) \approx \epsilon_0 - \alpha - 6\gamma + \gamma a^2 k^2$$

Masa efectiva:

$$m^* = \frac{\hbar^2}{2\gamma a^2}$$

#### 4.8 Observaciones sobre $\gamma$

- $\gamma$  mide el solapamiento de orbitales.
- $\Delta E = E_{\max} - E_{\min} = 6\gamma$ .
- $\gamma$  grande  $\rightarrow$  banda ancha,  $m^*$  pequeño.
- $\gamma$  pequeño  $\rightarrow$  banda angosta,  $m^*$  grande (más comprimido  $\rightarrow$  más metálico).

#### 4.9 Transiciones metálicas e influencia del desorden

- Transición aislante-metal (Mott): ocurre si  $n^{1/3}a_0 \approx 0.2$ .
- Localización de Anderson: si ancho de banda  $\approx \Delta V$  (desorden), electrones se localizan y función de onda decae exponencialmente.

#### 4.10 Hibridación

- Nombres particulares para algunos LCAO.
- Ejemplo hibridación sp en  $\text{CO}_2$ :

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_s + \psi_{px}), \quad \psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_s - \psi_{px})$$

- Ejemplo  $\text{sp}^2$  en  $\text{CH}_2\text{O}$ , grafeno (plano).
- Ejemplo  $\text{sp}^3$  en  $\text{CH}_4$ , diamante, Si, Ge con ángulo tetraédrico  $109.47^\circ$ .

### 5 Bandas (semi clásica)

#### 5.1 Numeración de las soluciones de la ecuación de Schrödinger

- Las soluciones se indexan como  $\varepsilon = \varepsilon_n(\mathbf{k})$ .
- Las bandas son periódicas en el espacio recíproco:

$$\varepsilon_n(\mathbf{k} + \mathbf{G}) = \varepsilon_n(\mathbf{k})$$

- En condiciones de borde periódicas:

$$N = N_1 N_2 N_3 \Rightarrow \text{hay } N \text{ valores independientes de } \mathbf{k}$$

- Con espín, cada banda contiene  $2N$  estados electrónicos.

#### 5.2 Conducción: conductores y aisladores

- Requiere:
  - Estado ocupado inicial.
  - Estado desocupado final.
  - Ambos cercanos en energía.
- Si no hay brecha: conductor.
- Si hay brecha: aislador (depende del tamaño y temperatura).

### 5.3 Velocidades electrónicas

- Velocidad de los electrones del orden de la velocidad de Fermi:

$$v_F \sim 10^6 \text{ m/s}$$

- Velocidad de arrastre:

$$v_{\text{drift}} \sim 10^{-4} \text{ m/s}$$

- Camino libre medio: Colisiones no ocurren con los núcleos.

$$\lambda \sim v_F \tau \gg a$$

### 5.4 Límite semiclásico

- El electrón se modela como un paquete de ondas localizado:

$$\Delta x \gg a, \quad \Delta k \ll \frac{1}{a}$$

- Estado:

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

### 5.5 Velocidad del electrón

$$\mathbf{v}_e = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon_n(\mathbf{k})$$

### 5.6 Ecuación para el cuasimomento

- En campos externos:  
La fuerza interna debida al campo de los iones ya está incorporada en  $\varepsilon_n$ . Luego,

$$\hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} = -e(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) = F_{\text{externa}}$$

- La energía total (potencial más banda) se conserva:

$$\varepsilon_n(\mathbf{k}(t)) - e\Phi(\mathbf{r}(t)) = \text{cte}$$

### 5.7 Condiciones de validez

- No hay transiciones entre bandas:  $n = \text{constante}$ .

- Campos externos débiles:

$$eEa \ll \frac{\varepsilon_g(k)^2}{\varepsilon_F}, \quad \hbar\omega_c \ll \frac{\varepsilon_g(k)^2}{\varepsilon_F}$$

donde  $\omega_c = \frac{eB}{m}$  es la frecuencia de ciclotrón.

## 5.8 Campo eléctrico uniforme

- Si me muevo en una banda:

$$\varepsilon_n(\mathbf{k}) - e\phi(\mathbf{x}) = \text{cte}$$

$$\frac{\partial \varepsilon_n}{\partial \mathbf{k}} \frac{d\mathbf{k}}{dt} - e \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{x}} \frac{d\mathbf{x}}{dt} = 0$$

Dado que:

$$\mathbf{v} = \frac{d\mathbf{x}}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_n}{\partial \mathbf{k}}$$

$$\rightarrow \hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} = -e\mathbf{E}$$

- Solución:

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

Con  $t$  el tiempo característico de la colisión  $\sim 10^{-14}\text{s}$ .

- Movimiento periódico en el espacio- $\mathbf{k}$ , pero la corriente neta no crece indefinidamente.

## 5.9 Densidades de corriente eléctrica y térmica

- Corriente eléctrica:

$$\mathbf{J}_e = -\frac{e}{4\pi^3\hbar} \int_{1^{\text{a}} \text{ zona}} \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon_n(\mathbf{k}) d^3k$$

- Corriente térmica:

$$\mathbf{J}_T = \frac{1}{8\pi^3\hbar} \int_{1^{\text{a}} \text{ zona}} \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon_n^2(\mathbf{k}) d^3k$$

## 5.10 Teorema del promedio

- Si  $\varepsilon_n(\mathbf{k})$  es periódica, entonces:

$$\langle \mathbf{v}_e \rangle = \frac{1}{\hbar} \langle \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon_n(\mathbf{k}) \rangle = 0$$

- Por tanto, bandas completamente llenas no contribuyen a la corriente:

$$\mathbf{J}_e = 0, \quad \mathbf{J}_T = 0$$

- Un campo  $E$  uniforme debería generar una corriente alterna pero las colisiones lo impiden.

## 5.11 Campo magnético uniforme

- Movimiento en espacio  $\mathbf{k}$ :

$$\hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} = -e\mathbf{v} \times \mathbf{B}$$

- Trayectorias sobre superficies de energía constante:

$$\varepsilon_n(\mathbf{k}) = \text{cte}, \quad k_z = \text{cte}$$

## 5.12 Electrones y huecos

- Electrones:

$$\mathbf{J}_e = -\frac{e}{4\pi^3\hbar} \int_{\text{ocupados}} \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon_n(\mathbf{k}) d^3k$$

- Huecos (bandas casi llenas):

$$\mathbf{J}_e = +\frac{e}{4\pi^3\hbar} \int_{\text{vacíos}} \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon_n(\mathbf{k}) d^3k$$

- Se puede usar una u otra, pero no ambas a la vez.

## 5.13 Masa efectiva del electrón

Para una banda escasamente llena con  $\varepsilon_n(k)$  mínimo en  $k = k_0$ .

- Definición:

$$\frac{1}{m_e^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 \varepsilon}{dk^2} \Big|_{k_0}$$

- Expansión cuadrática en torno al mínimo  $k_0$ :

$$\varepsilon_n(k) \approx \varepsilon_n(k_0) + \frac{\hbar^2}{2m_e^*} (k - k_0)^2$$

- Ecuación semiclásica del movimiento:

$$m_e^* \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = -e(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})$$

El efecto del potencial periódico es alterar la inercia del electrón. Este se comporta como si tuviera masa  $m_e^*$ .

## 5.14 Masa efectiva del hueco

- En bandas casi llenas:  $\frac{d^2 \varepsilon}{dk^2} < 0 \Rightarrow m_e^* < 0$

- Se define masa del hueco:

$$\frac{1}{m_h^*} = -\frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 \varepsilon}{dk^2}$$

- Movimiento:

$$m_h^* \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = +e(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})$$

- Los huecos se comportan como partículas con masa y carga positivas.

# 6 Semiconductores

## 6.1 Conceptos generales

- Los semiconductores tienen una brecha de energía significativa ( $E_g$ ) cerca del nivel de Fermi.

- A  $T = 0$ :

- Banda de valencia (BV): completamente ocupada.
- Banda de conducción (BC): completamente vacía.

- No hay conducción a  $T = 0$  porque no hay portadores libres.

## 6.2 Brecha de energía

- Energía de electrones:

$$\epsilon(k) = \epsilon_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*}$$

- Energía de huecos:

$$\epsilon(k) = \epsilon_v - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*}$$

- Energía mínima en BC:  $\epsilon_c$ .

- Energía máxima en BV:  $\epsilon_v$ .

- Brecha:

$$E_g = \epsilon_c - \epsilon_v$$

- Ejemplo para Si:

$$E_g \approx 1.12 \text{ eV a } 300\text{K}$$

Degeneración: se juntan dos bandas en  $k=0$ . Bandas con curvatura diferente: huecos *livianos* y *pesados*.

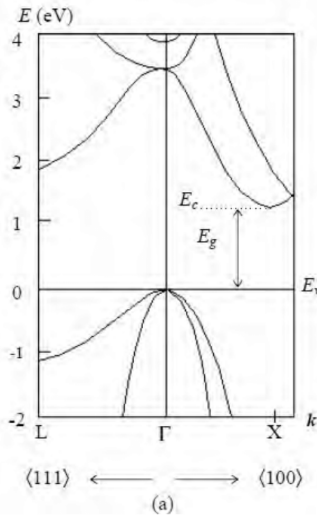


Figura 6: Estructura de Bandas en el Silicio

## 6.3 Excitación térmica y ley de acción de masas

- Excitación térmica genera pares electrón-hueco:

$$(e^- \text{ en BC}) + (h^+ \text{ en BV})$$

- Concentraciones:

$$n = n_c(T), \quad p = p_v(T)$$

## 6.4 Densidad de portadores

- Densidad de  $e^-$  y huecos:

$$n_c(T) = \int_{\epsilon_c} g_c(\epsilon) \cdot f_{FD}(\epsilon) d\epsilon \quad p_v(T) = \int_{\epsilon_v} g_v(\epsilon) \cdot (1 - f_{FD}(\epsilon)) d\epsilon$$

$$n_c(T) = \int_{\epsilon_c} \frac{g_c(\epsilon)}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} + 1} d\epsilon \quad p_v(T) = \int_{\epsilon_v} \frac{g_v(\epsilon) \cdot e^{\beta(\epsilon-\mu)}}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} + 1} d\epsilon$$

- En la BC,  $e^{\beta(\epsilon-\mu)} \geq e^{\beta(\epsilon_c-\mu)} \gg 1$ .

$$n_c(T) = e^{\beta(\mu-\epsilon_c)} \int_{\epsilon_c}^{\infty} e^{\beta(\epsilon_c-\epsilon)} g_c(\epsilon) d\epsilon$$

- En la BV  $e^{\beta(\epsilon-\mu)} \ll 1$ .

$$p_v(T) = e^{\beta(\epsilon_v-\mu)} \int_{-\infty}^{\epsilon_v} e^{\beta(\epsilon-\epsilon_v)} g_v(\epsilon) d\epsilon$$

- Juntando lo anterior, se obtiene la ley de acción de masas:

$$np = n_i^2 = e^{-\frac{E_g}{k_B T}} N_c(T) P_v(T)$$

- Para semiconductores intrínsecos (no le han puesto externamente ni huecos ni electrones), la concentración de electrones en la BC es igual a la de huecos en la BV:

$$n = p = n_i = e^{-\frac{E_g}{2k_B T}} \sqrt{N_c(T) P_v(T)}$$

## 6.5 Funciones de densidad de estados efectivas

- Aproximación semiclasica:

$$N_c(T) = \frac{1}{2} \left( \frac{2m_c k_B T}{\pi \hbar^2} \right)^{3/2}, \quad P_v(T) = \frac{1}{2} \left( \frac{2m_v k_B T}{\pi \hbar^2} \right)^{3/2}$$

- Entonces:

$$n_i = \frac{1}{2} \left( \frac{2k_B T}{\pi \hbar^2} \right)^{3/2} (m_c m_v)^{3/4} e^{-\frac{E_g}{2k_B T}}$$

## 6.6 Potencial químico

- Caso intrínseco:

$$\mu_i = \epsilon_v + \frac{1}{2} E_g + \frac{3}{4} k_B T \ln \left( \frac{m_v}{m_c} \right)$$

- En dopados:

$$\frac{\Delta n}{n_i} = e^{\beta(\mu-\mu_i)} - e^{-\beta(\mu-\mu_i)} = 2 \sinh \left( \frac{\mu - \mu_i}{k_B T} \right), \quad \Delta n = n - p$$

Así,  $\mu$  sube con dopado n, baja con p y si el dopado es muy alto se aproxima a los bordes de la banda prohibida donde está degenerado.

## 6.7 Semiconductores dopados

- Tipo n (donadores):

$$n \approx N_d$$

$$p \approx \frac{n_i^2}{N_d}$$

$$\mu \approx \mu_i + k_B T \ln \left( \frac{N_d}{n_i} \right)$$



- Tipo p (aceptores):

$$\begin{aligned} p &\approx N_a \\ n &\approx \frac{n_i^2}{N_a} \\ \mu &\approx \mu_i - k_B T \ln \left( \frac{N_a}{n_i} \right) \end{aligned}$$

## 6.8 Juntura p-n

- Diferencia de potencial en equilibrio:

$$e\Delta\phi = E_g + k_B T \ln \left( \frac{N_a N_d}{N_c(T) P_v(T)} \right)$$

- Cargas espaciales:

$$N_a d_a = N_d d_d$$

- Dado  $\nabla^2 \phi = -\rho/\epsilon_0 k$ , se puede escribir la densidad de carga como,

$$\rho = \begin{cases} 0 & , x < -d_a \\ -N_a e & , 0 > x > d_a \\ N_d e & , 0 < x < d_d \\ 0 & , x > d_d \end{cases}$$

- El potencial será, por continuidad en  $x = 0$ :

$$\Delta\phi_0 = \frac{e}{2\epsilon_r \epsilon_0} (N_a d_a^2 + N_d d_d^2) \quad ; \quad \Delta\phi_0 = \phi(\infty) - \phi(-\infty)$$

## 6.9 Corriente en el diodo pn

- Ecuación del diodo:

$$I = I_0 \left( e^{\frac{eV}{k_B T}} - 1 \right)$$

- $I_0$  depende fuertemente de  $E_g$ :

$$I_0 \approx e^{-\frac{E_g}{k_B T}}$$

## 6.10 Condensador MOS y memorias

- En un MOS con semiconductor tipo p:
  - $V_g < 0$ : acumulación de huecos.
  - $V_g > 0$ : depresión (repele a los huecos).
  - $V_g \gg 0$ : inversión, forma un canal n.
- DRAM: usa condensadores MOS para almacenar bits.
- CCD: transporta cargas secuencialmente mediante control de potenciales.

## 6.11 Conclusión

- La física de semiconductores combina:
  - La teoría de bandas.
  - Estadística de Fermi-Dirac.
  - Dopado controlado para dispositivos electrónicos.

## 7 Niveles de Landau

### 7.1 Sistema físico considerado

- Gas de electrones confinado en dirección  $z$ :  $0 \leq z \leq L$ .
- Campo magnético uniforme  $\vec{B}$  aplicado.
- Se considera que  $\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$ .
- Potenciales vector posibles:

- $\vec{A} = B(-y, 0, 0)$  (se usará este)
- $\vec{A} = B(0, x, 0)$
- $\vec{A} = \frac{B}{2}(-y, x, 0)$  (medida de Landau)

### 7.2 Momento canónico vs cinético

- Se reemplaza el momento cinético por el momento canónico:

$$\vec{p}_{\text{canónico}} = \vec{p}_{\text{cinético}} - q\vec{A}$$

- Para un electrón ( $q = -e$ ), se tiene:

$$\vec{p}_{\text{canónico}} = \vec{p}_{\text{cinético}} + e\vec{A}$$

### 7.3 Hamiltoniano cuántico

- En mecánica cuántica, para un electrón ( $q = -e$ ) en potencial nulo:

$$\hat{H} = \frac{1}{2M} [(\hat{p}_x - eBy)^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2]$$

- Se busca solución tipo:

$$\psi(x, y, z) = e^{ik_x x} \sin\left(\frac{n\pi z}{L}\right) \phi(y)$$

### 7.4 Condiciones de borde

- En  $z$ : confinamiento total  $\Rightarrow \psi(0) = \psi(L) = 0$ , con  $n = 1, 2, 3, \dots$
- En  $x = w$ : condición periódica:

$$e^{ik_x w} = 1 \Rightarrow k_x = \frac{2\tilde{n}\pi}{w}, \quad \Delta k = \frac{2\pi}{w}$$

### 7.5 Resolución en $z$

$$\hat{p}_z^2 \psi = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2ML^2} \psi$$

### 7.6 Resolución en $x, y$

- $\hat{p}_x \psi = \hbar k \psi$
- $(\hat{p}_x - eBy)\psi = (\hbar k - eBy)\psi$
- El Hamiltoniano se reescribe como:

$$\hat{H}\psi = \left[ \frac{1}{2M} (\hbar k - eBy)^2 - \frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dy^2} + \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2ML^2} \right] \phi(y) = E\phi(y)$$

- Se define:

$$E' = E - \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2ML^2}$$

- Lo que lleva a:

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\phi''(y) + \frac{1}{2}M\omega_c^2(y - y_0)^2\phi(y) = E'\phi(y)$$

con:

$$\omega_c = \frac{eB}{M}, \quad y_0 = \frac{\hbar k}{eB}$$

## 7.7 Solución: niveles de Landau

- Ecuación tipo oscilador armónico centrado en  $y_0$ .
- Energía:

$$E' = \left(m + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_c$$

- Energía total:

$$E(n, m) = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2ML^2} + \left(m + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_c$$

- Los niveles de energía en  $y$  no dependen de  $k \Rightarrow$  degeneración.

## 7.8 Degeneración de los niveles

- Para un sistema de ancho  $w$ , la condición  $0 < y_0 < w$  da:

$$0 < \frac{\hbar k}{eB} < w \Rightarrow k_{\max} = \frac{weB}{\hbar}$$

- Como  $\Delta k = \frac{2\pi}{w}$ , el número de valores distintos de  $k$  es:

$$\frac{k_{\max}}{\Delta k} = \frac{eBw^2}{h}$$

- Entonces, la degeneración por nivel es:

$$D = \frac{eBw^2}{h}$$

- Definiendo el flujo magnético:

$$\Phi = Bw^2, \quad \phi_0 = \frac{h}{e} \Rightarrow D = \frac{\Phi}{\phi_0}$$

## 7.9 Conclusión

- La cuantización del movimiento transversal de electrones en un campo magnético da lugar a los niveles de Landau.
- A bajas temperaturas y campos magnéticos intensos, sólo los primeros niveles están ocupados.
- La degeneración está determinada por el flujo magnético a través del área del sistema.

# 8 Superconductores

## 8.1 Superconductor vs. conductor perfecto

- Conductor perfecto:  $\nabla \times \vec{E} + \partial \vec{B} / \partial t = 0 \Rightarrow \vec{B}$  se congela.
- Superconductor:  $\vec{B}$  es expulsado (efecto Meissner-Ochsenfeld).

## 8.2 Modelos del efecto Meissner

- Opción 1: corrientes superficiales apantallan el campo magnético externo.
- Opción 2: material con susceptibilidad magnética  $\chi = \frac{M}{H} = -1 \Rightarrow B = \mu_0(H + M) = \mu_0(H - H) = 0$ .

## 8.3 Diamagnetismo perfecto

- Superconductor:  $\chi \approx -1$ , diamagnetismo perfecto (fuertemente repelido por B).
- Levitación magnética como consecuencia.

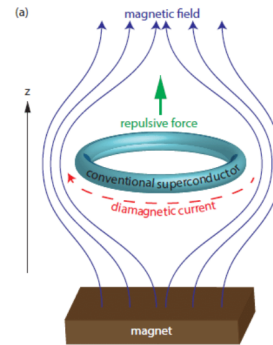


Figura 7: Efecto Meissner

## 8.4 Corriente persistente

- Resistencia cero en corriente continua  $\Rightarrow$  posibilidad de mantener corriente constante indefinidamente.

## 8.5 Corriente crítica y quenching

- Existe una densidad crítica  $J_c$  de corriente.
- Si  $J > J_c \Rightarrow$  transición al estado normal.
- Energía almacenada:  $U = \frac{1}{2}LI^2$ , con  $L$  la inductancia e  $I$  la corriente permanente.
- Puede evaporar helio líquido en accidentes.

## 8.6 Campo magnético crítico

- Existe  $H_c$  tal que si  $H > H_c$ , el material deja de ser superconductor.
- $H_c(T)$  decrece con la temperatura,  $H_c(T = T_c) = 0$ .

## 8.7 Superconductores tipo I y tipo II

- Tipo I: transición de segundo orden a  $B = 0$ , de primer orden si  $B \neq 0$ . Si  $B = 0$ , la entropía es continua pero su derivada no (calor específico  $c_p = \frac{\partial S}{\partial T}|_v$  es discontinuo).
- Tipo II: tienen dos campos críticos,  $H_{c1}$  y  $H_{c2}$ , entre los cuales el campo penetra en forma de vórtices (estado mixto).

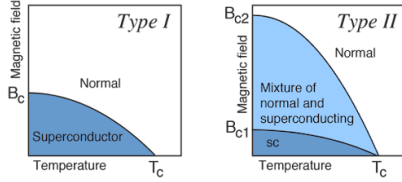


Figura 8: Superconductores tipo I y II.

## 8.8 Modelo de dos portadores

- Carga dividida entre electrones normales ( $n_n$ ) y superelectrones ( $n_s$ ) quienes se mueven sin experimentar colisiones dentro del material.
- En corriente alterna aparece impedancia debido a la masa de ambos.

## 8.9 Ecuaciones de London

- Dado

$$\vec{J} = -n_s e \vec{v}_s$$

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} = -\frac{e \vec{E}}{m}$$

- 1ª ecuación de London:

$$\frac{\partial \vec{J}}{\partial t} = \frac{n_s e^2}{m} \vec{E}$$

- 2ª ecuación de London (combinando con ecuaciones de Maxwell):

$$\nabla \times \vec{J} + \frac{n_s e^2}{m} \vec{B} = 0$$

- Ecuación de Helmholtz para  $\vec{B}$  y la distancia de penetración:

$$\nabla^2 \vec{B} = \frac{1}{\lambda_L^2} \vec{B}, \quad \lambda_L^2 = \frac{m}{\mu_0 n_s e^2}$$

La distancia de penetración es la profundidad a la que el campo magnético externo puede entrar en el superconductor antes de ser atenuado.

## 8.10 Efecto isotópico

- La temperatura crítica  $T_c$  depende del isótopo:  $T_c \propto \frac{1}{\sqrt{M}}$ .

## 8.11 Calor específico y brecha de energía

- En el estado normal:  $C \sim T^3$  (ley de Debye).

- En el estado superconductor:

$$C \sim e^{-\Delta/kT}$$

- $\Delta$  es la brecha de energía,  $\Delta(T=0) \approx 1.76 k_B T_c$

$$\frac{\Delta(T)}{\Delta(0)} = \tanh \alpha \left( \frac{T_c}{T} - 1 \right), \quad \alpha = 1.76$$

## 8.12 Modelo de dos niveles

- Dos niveles: 0 y  $2\Delta$ .

- Función de partición:

$$Z = 1 + e^{-\beta \Delta}$$

- Energía media:

$$\langle \epsilon \rangle = \frac{\Delta}{1 + e^{\beta \Delta}}$$

- Calor específico:

$$c_v = \left( \frac{\Delta}{kT} \right)^2 \frac{e^{-\Delta/kT}}{(1 + e^{-\Delta/kT})^2}$$

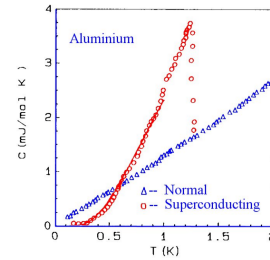


Figura 9: Calor específico

## 8.13 Pares de Cooper

- Dos electrones con  $k$  y  $-k$ , spins opuestos, forman un estado ligado.
- La interacción es atractiva gracias al intercambio de fonones.
- El par es estable mientras el incremento sobre  $\epsilon_F$  sea menor a  $2\Delta$ .

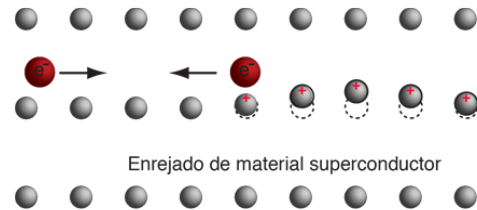


Figura 10

### 8.14 Modelo de BCS simplificado

- Potencial efectivo de Cooper:

$$V(k, k') = \begin{cases} -V_0 & \text{si } \varepsilon_F \leq \varepsilon \leq \varepsilon_F + \hbar\omega_q \\ 0 & \text{otro caso} \end{cases}$$

- Condición de estado ligado:

$$1 = \int_{\varepsilon_F}^{\varepsilon_F + \hbar\omega_q} \frac{V(\varepsilon')g(\varepsilon')}{2\varepsilon_F - \Delta - 2\varepsilon'} d\varepsilon'$$

- Tomando  $g(\varepsilon') \sim g(\varepsilon_F)$ .

- Energía de ligadura:

$$\Delta(0) = 2\hbar\omega_q \exp\left(-\frac{1}{g(\varepsilon_F)V_0}\right)$$

- Temperatura crítica:

$$k_B T_c = 1.13\hbar\omega_q \exp\left(-\frac{1}{g(\varepsilon_F)V_0}\right)$$

- Relación universal:

$$\frac{2\Delta(0)}{k_B T_c} = 3.53$$

### 8.15 Densidad de corriente crítica

- Energía libre por volumen en el estado superconductor:

$$\delta u \approx \frac{1}{2}g(\varepsilon_F)\Delta^2$$

- Comparando con la energía magnética:

$$\frac{1}{2}\mu_0\lambda_L^2 J_c^2 \approx \frac{1}{2}g(\varepsilon_F)\Delta^2$$

- De donde:

$$J_c = \Delta \sqrt{\frac{g(\varepsilon_F)}{\mu_0\lambda_L^2}}$$

- En términos del campo crítico:

$$H_c^2 = \mu_0 g(\varepsilon_F) \Delta^2$$

Si  $J > J_c$  es energéticamente más conveniente pasar al estado normal.

### 8.16 Distancia de correlación

- Estimación semiclásica:

$$\xi_0 \sim \frac{\hbar v_F}{\Delta}$$

- Típicamente  $\xi_0 \sim 100 \text{ nm} - 1 \mu\text{m}$