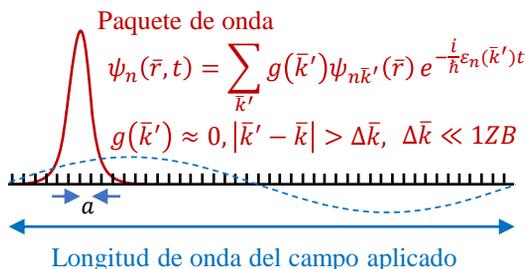


# Dinámica de electrones de Bloch

## Modelo semiclásico para la dinámica de e<sup>-</sup>



$$\vec{v}_g(\vec{k}) = \frac{\partial \omega}{\partial \vec{k}} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \vec{k}}$$

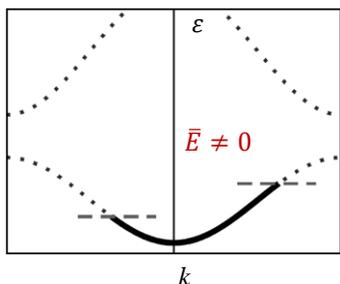
$$\dot{\vec{r}} = \vec{v}_n(\vec{k})$$

↓  
Evolución de la posición en el tiempo en la banda n

El modelo semiclásico describe la dinámica de paquetes de onda bien definidos en la 1ZB, con una precisión en la localización en el espacio real de varios parámetros de red, satisfaciendo el principio de incertidumbre.

Campos externos aplicados deben variar lentamente en dimensiones características del paquete y del parámetro de red. Sus amplitudes y frecuencias deben ser suficientemente pequeñas como para no producir transiciones entre bandas.

## Bandas llenas y semillenas



Densidad de corriente asociada a una banda llena:  $\vec{J} = -e \int_{1ZB} \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_n}{\partial \vec{k}} \frac{d\vec{k}}{4\pi^3}$

Como  $\varepsilon_n$  es una función periódica  $\xrightarrow{\text{Teorema}}$  La integral en una CP se anula.

→ Solo bandas parcialmente llenas deben ser consideradas para la conducción eléctrica.

## Campo eléctrico DC

Trabajo  $\delta\varepsilon$  realizado por un campo  $\vec{E}$  en un intervalo  $\delta t$ :  $\delta\varepsilon = -e\vec{E}\vec{v}_n(\vec{k})\delta t$

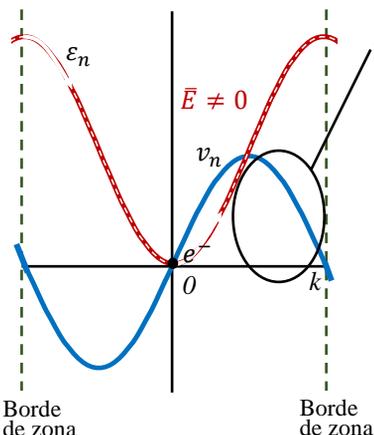
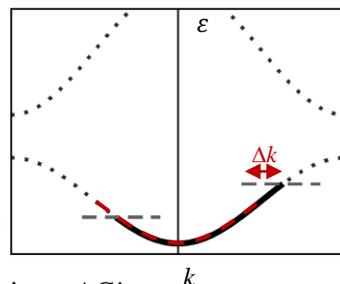
Además:  $\delta\varepsilon = \frac{\partial \varepsilon_n}{\partial \vec{k}} \delta\vec{k} = \hbar \vec{v}_n(\vec{k}) \delta\vec{k} \rightarrow \hbar \delta\vec{k} = -e\vec{E}\delta t \rightarrow \hbar \dot{\vec{k}} = -e\vec{E} \rightarrow \vec{k}(t) = \vec{k}(0) - \frac{e\vec{E}t}{\hbar}$

$$\hbar \dot{\vec{k}} = -e \left[ \vec{E} + \frac{1}{c} \vec{v}_n \times \vec{H} \right]$$

Si se agrega también un campo magnético

→ A un tiempo  $t$  todos los e<sup>-</sup> cambian su vector de onda en la misma cantidad

$$\begin{cases} \dot{\vec{r}} = \vec{v}_n(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_n}{\partial \vec{k}} \\ \hbar \dot{\vec{k}} = -e\vec{E} \end{cases} \rightarrow \begin{cases} \vec{k}(t) = \vec{k}(0) - \frac{e\vec{E}t}{\hbar} \\ \vec{v}_n(\vec{k}(t)) = \vec{v}_n\left(\vec{k}(0) - \frac{e\vec{E}t}{\hbar}\right) \end{cases}$$



¡Aquí la aceleración es opuesta a la fuerza de  $\vec{E}$ !

→ ¡Un campo eléctrico DC produce una corriente AC!

¿Por qué? → Es una consecuencia de la fuerza adicional ejercida por el potencial periódico, cuyo efecto está presente en  $\varepsilon_n(\vec{k})$ .

¿Se observa esto en la realidad? → No, dado que existen impurezas (y fonones) en los materiales reales que dan lugar a colisiones e-impureza (y e-fonón) con un tiempo medio ( $\tau_c$ ) entre colisiones  $\sim 1$  fs, varios ordenes de magnitud menor al tiempo requerido para observar una oscilación de Bloch completa.

¡Impurezas (y fonones) son el motivo de la existencia de una resistencia eléctrica!

# Dinámica de electrones de Bloch

## Campo eléctrico DC

$$J \stackrel{\text{1D}}{=} -e \int_{\text{Estados ocupados}} v_n(k) \frac{dk}{\pi} \approx -ev_F \frac{2\Delta k}{\pi} = -ev_F \frac{-2eE\tau_c}{\pi\hbar} = \underbrace{\frac{2e^2 v_F \tau_c}{\pi\hbar}}_{\text{Conductividad}} E = \sigma E$$

$$n = \frac{N}{L} = \frac{2}{L} (2k_F) \left( \frac{L}{2\pi} \right) = \frac{2k_F}{\pi} \stackrel{\text{e}^- \text{ libres}}{=} \frac{2mv_F}{\pi\hbar} \rightarrow \sigma = \frac{e^2 n \tau_c}{m}$$

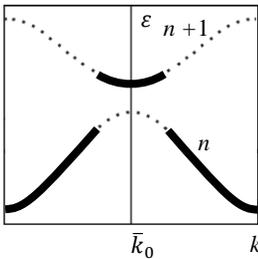
- La conductividad disminuye cuando  $\tau_c$  disminuye.
- A medida que aumenta la temperatura, aumenta la probabilidad de colisión con fonones (disminuye  $\tau_c$ ), y el sistema se hace más resistivo.
- A baja temperatura dominan colisiones con impurezas.

## Huecos

En una dada banda,  $n$ :  $\bar{J} = -e \int_{\text{Estados ocupados}} \bar{v}_n(\bar{k}) \frac{d\bar{k}}{4\pi^3} = \underbrace{\left( -e \int_{\text{1ZB}} \bar{v}_n(\bar{k}) \frac{d\bar{k}}{4\pi^3} \right)}_{=0} - \left( -e \int_{\text{Estados desocupados}} \bar{v}_n(\bar{k}) \frac{d\bar{k}}{4\pi^3} \right)$

→  $\bar{J} = e \int_{\text{Estados desocupados}} \bar{v}_n(\bar{k}) \frac{d\bar{k}}{4\pi^3}$  → La corriente producida por los  $e^-$  es la misma que se produciría si los estados ocupados estuviesen desocupados, y los desocupados estuviesen ocupados con partículas de carga  $+e$ : Huecos o Agujeros.

¿Cuándo conviene hablar de electrones y cuándo de huecos?



Supongamos un caso en que las energías de los estados ocupados más energéticos en una banda ( $n$ ) están cerca del tope de la banda.

Si aproximamos esta región hasta segundo orden en  $\bar{k}$  →  $\varepsilon(\bar{k}) \approx \varepsilon(\bar{k}_0) - \underbrace{A}_{>0} (\bar{k} - \bar{k}_0)^2$

Definimos  $m^*$  tal que  $A = \hbar^2/2m^*$  →  $\bar{v}(\bar{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \bar{k}} \approx -\frac{\hbar(\bar{k} - \bar{k}_0)}{m^*}$

→  $\bar{a}(\bar{k}) \approx -\frac{\hbar}{m^*} \dot{\bar{k}}$  (La aceleración resulta opuesta a  $\dot{\bar{k}}$  al introducir un campo externo.)

→  $\hbar \dot{\bar{k}} = -e\bar{E} = -m^* \bar{a}$  → El  $e^-$  responde como si tuviera masa negativa.

O... podemos pensar en partículas con carga positiva ( $+e$ ) y masa positiva ( $m^*$ ) que se mueven en la dirección de la fuerza aplicada ( $e\bar{E} = m^* \bar{a}$ ): Huecos.

La banda  $n + 1$ , por otro lado, conviene ser descrita con electrones.

## Masa efectiva

De manera general, se define el tensor de masa efectiva:  $[\vec{M}^{-1}(\bar{k})]_{ij} = \underbrace{\pm}_{\substack{+ \text{ (cerca de fondo de banda: electrones)} \\ - \text{ (cerca de tope de banda: huecos)}}} \frac{\partial^2 \varepsilon(\bar{k})}{\partial k_i \partial k_j} = \pm \frac{1}{\hbar} \frac{\partial v_i}{\partial k_j}$

→  $\vec{M}(\bar{k}) \bar{a} = \mp e \left[ \bar{E} + \frac{1}{c} \bar{v} \times \bar{H} \right]$

# Modelo de Drude – Efecto Hall Clásico y Cuántico

## Modelo de Drude

- Los iones se encuentran fijos en la red y los  $e^-$  forman un gas. Los  $e^-$  pueden colisionar, y entre colisiones se mueven en línea recta. Ante la presencia de un campo externo  $\rightarrow$  Leyes de Newton.
- Probabilidad de colisión por unidad de tiempo:  $1/\tau_c \rightarrow dt/\tau_c$  es la probabilidad de colisionar en  $dt$ .
- Las colisiones son eventos instantáneos que alteran la velocidad del  $e^-$ . Al colisionar, el  $e^-$  thermaliza con el entorno y emerge en una dirección al azar con una velocidad determinada por la temperatura en el lugar de la colisión (estadística de MB).

Aplicamos una fuerza  $\vec{f}(t) \rightarrow \vec{p}(t+dt) \approx \left(1 - \frac{dt}{\tau_c}\right) \vec{p}(t) + \vec{f}(t)dt + \frac{dt}{\tau_c} \vec{f}(t)dt$

Probabilidad de no colisionar entre  $t$  y  $t+dt$   
Probabilidad de colisionar entre  $t$  y  $t+dt$

$\rightarrow \vec{p}(t+dt) = \vec{p}(t) + \vec{f}(t)dt - \frac{dt}{\tau_c} \vec{p}(t) \rightarrow \frac{\vec{p}(t+dt) - \vec{p}(t)}{dt} = \frac{d\vec{p}(t)}{dt} = \vec{f}(t) - \frac{\vec{p}(t)}{\tau_c}$

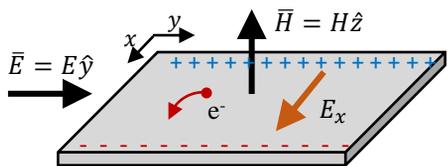
A primer orden en  $dt$

Aplicamos un campo eléctrico DC:  $\frac{d\vec{p}(t)}{dt} = -e\vec{E} - \frac{\vec{p}(t)}{\tau_c}$  Solución estacionaria:  $d\vec{p}/dt = 0$   $\rightarrow \vec{p} = -e\vec{E}\tau_c$

Densidad de corriente:  $\vec{J} = -ne\vec{v} = -ne\frac{\vec{p}}{m} \rightarrow \vec{p} = -\frac{\vec{J}m}{ne} = -e\vec{E}\tau_c \rightarrow \vec{J} = \frac{ne^2\tau_c}{m}\vec{E} = \sigma\vec{E}$

## Efecto Hall

Fuerza de Lorentz:  $\vec{f} = -e\left(\vec{E} + \frac{\vec{v}}{c} \times \vec{H}\right) \rightarrow \frac{d\vec{p}(t)}{dt} = \vec{f}(t) - \frac{\vec{p}(t)}{\tau_c} = -e\left(\vec{E} + \frac{\vec{v}}{c} \times \vec{H}\right) - \frac{\vec{p}(t)}{\tau_c}$



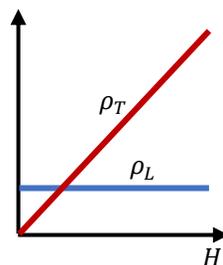
Estado estacionario ( $d\vec{p}(t)/dt = 0$ ):  $\vec{p} + e\tau_c \frac{\vec{v}}{c} \times \vec{H} = -e\vec{E}\tau_c$

$\vec{J} = -n_e e \vec{v} = -n_e e \frac{\vec{p}}{m} \rightarrow \vec{J} + \frac{e\tau_c \vec{J}}{m c} \times \vec{H} = \frac{e^2 n_e \tau_c}{m} \vec{E} = \sigma_0 \vec{E}$

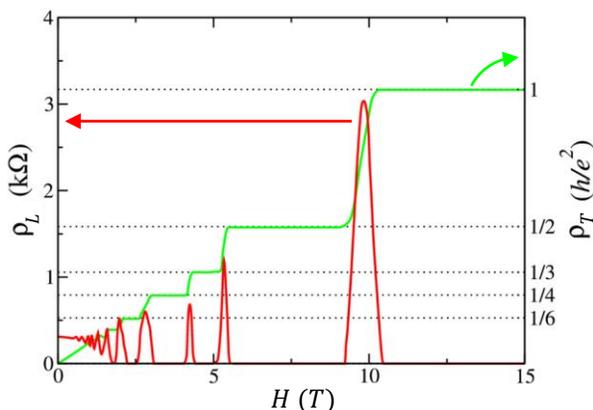
$\rightarrow (J_x, J_y) + \frac{e\tau_c}{mc} (J_y H, -J_x H) = \sigma_0 \vec{E} \rightarrow (J_x, J_y) + \frac{eH}{mc} \tau_c (J_y, -J_x) = \sigma_0 \vec{E}$

$\rightarrow \begin{pmatrix} 1 & \omega_c \tau_c \\ -\omega_c \tau_c & 1 \end{pmatrix} \vec{J} = \sigma_0 \vec{E} \rightarrow \rho = \frac{1}{\sigma_0} \begin{pmatrix} 1 & \omega_c \tau_c \\ -\omega_c \tau_c & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho_L & \rho_T \\ -\rho_T & \rho_L \end{pmatrix}$

Coeficiente Hall:  $R_H = \frac{\rho_T}{H} = \frac{\omega_c \tau_c}{\sigma_0 H} = \frac{1}{n_e e c}$



## Observaciones experimentales (gas bidimensional de electrones en heteroestructuras semiconductoras)

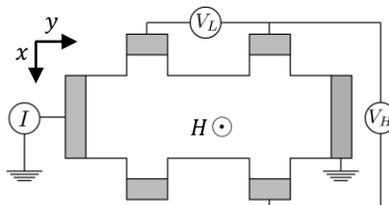


Experimentalmente se observa que  $\rho_T$  presenta mesetas planas en ciertos rangos de campo magnético.

También se observa que  $\rho_L$  se anula en las mesetas de  $\rho_T$ .

En las mesetas, los valores de resistividad medidos son:  $\rho_T = \frac{h}{e^2} \frac{1}{\nu}$   $\nu \in \mathbb{Z}$  (con un error de 1 en  $10^9$ )

El centro de cada meseta ocurre cuando:  $H = \frac{hc n_e}{ve} = \frac{n_e}{\nu \Phi_0}$  Cuanto de flujo



¡El resultado es independiente del material, la pureza o geometría de la muestra!

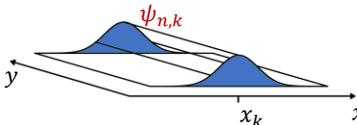
# Gas bidimensional de electrones – Niveles de Landau

## Gas bidimensional de electrones libres en un campo magnético perpendicular uniforme

$$\mathcal{H} = \frac{\left(\vec{p} + \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2}{2m} \rightarrow \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2m}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial y} + \frac{e}{c}Hx\right)^2\right)\psi(\vec{r}) = \varepsilon\psi(\vec{r})$$

$\vec{A} = (0, Hx)$  (Gauge de Landau)

$$\rightarrow \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - i\hbar x \underbrace{\omega_c}_{= eH/mc} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{1}{2}m\omega_c^2 x^2\right)\psi(\vec{r}) = \varepsilon\psi(\vec{r}) \rightarrow \text{Proponemos: } \psi(\vec{r}) = e^{iky}u(x)$$

$$\rightarrow \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \hbar k x \omega_c + \frac{1}{2}m\omega_c^2 x^2\right)u(x) = \varepsilon u(x)$$


$$\frac{1}{2}m\omega_c^2\left(x + \frac{\hbar k}{m\omega_c}\right)^2 = \frac{1}{2}m\omega_c^2(x - x_k)^2$$

$$\rightarrow \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega_c^2(x - x_k)^2\right)u(x) = \varepsilon u(x) \rightarrow$$

(Oscilador armónico desplazado)

Niveles de Landau ( $\varepsilon_n$  independiente de  $k$ )

$$\psi_{n,k}(\vec{r}) = e^{iky} H_n\left(\frac{x - x_k}{l_H}\right) e^{-\frac{(x-x_k)^2}{2l_H^2}}$$

$$\varepsilon_n = \hbar\omega_c\left(n + \frac{1}{2}\right) \quad \underbrace{l_H}_{= \sqrt{\hbar c/eH}}$$

## Niveles de Landau (NL): Degeneración y llenado

Condiciones de contorno periódicas en  $\hat{y}$  (Lámina rectangular de lados  $L_x, L_y$ )

$$\rightarrow k = \frac{2\pi}{L_y}j, \quad j \in \mathbb{Z} \rightarrow \underbrace{x_k}_{= -\frac{\hbar k c}{eH}} = -\frac{2\pi\hbar c j}{eHL_y} \rightarrow 0 < -\frac{\hbar c j}{eHL_y} < L_x$$

$$\rightarrow -\frac{eHL_x L_y}{\hbar c} < j < 0 \rightarrow \text{N}^\circ \text{ de estados por unidad de área en cada NL: } n_H = \frac{eH}{\hbar c}$$

$$\rightarrow n_H = \frac{H}{\Phi_0} \rightarrow \text{N}^\circ \text{ de estados en un NL en una muestra de área } S: \frac{SH}{\Phi_0} = \frac{\Phi}{\Phi_0}$$

Cada estado en un NL ocupa un área:  $\frac{\hbar c}{eH} = 2\pi \underbrace{l_H^2}_{= 25 \text{ nm}^2} \quad (H = 1 \text{ T})$

Nº de NL ocupados:  $\nu = \frac{n_e}{n_H} = \frac{\hbar c}{eH} n_e$

A medida que  $H$  crece, aumenta la cantidad de estados en cada NL y disminuye el Nº de NL ocupados.  $\varepsilon_F$  se mueve de manera de mantener  $n_e$  constante.

