Estructura de la Materia 2 - Verano de 2026

Guía 6: Dinámica semiclásica de electrones

1. **Corriente nula en una banda llena.**

   En la aproximación semiclásica (banda única, sin transiciones inter-banda), la corriente asociada a una banda n se escribe como

$$\mathbf{j}_n = -e \int_{1\text{ZB}} \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\, f_n(\mathbf{k})\, \mathbf{v}_n(\mathbf{k}), \qquad \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon_n(\mathbf{k}),$$

   donde $f_n(\mathbf{k})$ es la ocupación y 1ZB es una celda primitiva de la red recíproca.

   Demuestre que si la banda está *completamente llena*, $f_n(\mathbf{k}) = 1$ en toda la 1ZB, y $\varepsilon_n(\mathbf{k})$ es periódica en la red recíproca $\big(\varepsilon_n(\mathbf{k}+\mathbf{K}) = \varepsilon_n(\mathbf{k})\big)$, entonces la corriente es nula:

$$\mathbf{j}_n = -\frac{e}{\hbar} \int_{1\text{ZB}} \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\, \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon_n(\mathbf{k}) = \mathbf{0}.$$

   Para ello, se sugiere probar el siguiente lema de periodicidad: si $f(\mathbf{r})$ es una función periódica en una red de Bravais, $f(\mathbf{r}+\mathbf{R}) = f(\mathbf{r})$, y C es una celda primitiva, entonces

$$\int_C d\mathbf{r}\, \nabla f(\mathbf{r}) = \mathbf{0}, \qquad \int_C d\mathbf{r}\, \nabla^2 f(\mathbf{r}) = 0.$$

   Sugerencia: aplicar el teorema de Gauss y usar que en caras opuestas f toma el mismo valor por periodicidad, mientras que la normal cambia de signo. El mismo resultado vale en el espacio recíproco tomando $C = 1\text{ZB}$.

2. **Dinámica semiclásica con campo eléctrico.**

   En la aproximación semiclásica, el electrón se describe como un *paquete de ondas de Bloch*. La dinámica del centro del paquete para una banda n está gobernada por

$$\dot{\mathbf{r}} = \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon_n(\mathbf{k}), \qquad \hbar \dot{\mathbf{k}} = \mathbf{F} = -e\big(\mathbf{E} + \dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{B}\big).$$

   Recuerde que el vector $\hbar\mathbf{k}$ es el *momento cristalino* (cuasi-momento) y no coincide, en general, con el momento mecánico del electrón. Note que $\mathbf{v}_n(\mathbf{k}) \neq \hbar\mathbf{k}/m$ (salvo en electrón libre).

   En el régimen parabólico local, la aceleración puede escribirse en términos de la inversa del tensor de masa efectiva:

$$\ddot{r}_i = \sum_j \left[M_n^{-1}(\mathbf{k})\right]_{ij} F_j, \qquad \left[M_n^{-1}(\mathbf{k})\right]_{ij} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \varepsilon_n(\mathbf{k})}{\partial k_i\, \partial k_j}.$$

   Considere la dispersión tight-binding de una red cuadrada:

$$\epsilon(\mathbf{k}) = \epsilon_0 - 2\, t_0 \left[\cos(k_x a) + \cos(k_y a)\right],$$

   bajo la acción exclusiva de un campo eléctrico y sin campo magnético.

a) Calcule la velocidad de grupo y descríbala sobre la recta $k_y = 0$.

b) Si no hay campos externos, determine $\mathbf{r}(t)$ para un electrón con $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$.

c) Con $\mathbf{E} = (0, E_y)$, obtenga $\mathbf{k}(t)$ y describa la trayectoria en espacio real.

d) Calcule el tensor de masa efectiva y la aceleración del electrón para el mismo campo eléctrico. Discuta si, en general, la aceleración es paralela al campo.

3. **Condición para observar oscilaciones de Bloch.**

En un cristal sometido a un campo eléctrico uniforme $\mathbf{E}$, el período de la oscilación de Bloch es

$$T_B = \frac{2\pi}{\omega_B}, \qquad \omega_B = \frac{eEa}{\hbar},$$

donde a es el parámetro de red característico en la dirección del campo. Para que las oscilaciones sean observables, se requiere típicamente que el electrón complete al menos una oscilación antes de relajarse, es decir, $T_B \lesssim \tau$, donde τ es el tiempo de relajación.

Calcule el valor mínimo del campo E para observar oscilaciones de Bloch en los siguientes casos:

a) **Cobre.** El tiempo de relajación es $\tau \simeq 20 \times 10^{-14}$ s y el orden del parámetro de red $a \simeq 3{,}6$ Å.

b) **GaAs.** A bajas temperaturas, el GaAs alcanza $\tau \simeq 3 \times 10^{-10}$ s y se pueden construir estructuras artificiales con celdad unidad del orden de $a \simeq 100$ Å.

4. **Dinámica semiclásica con campo magnético.**

Considere electrones en un cristal bidimensional cuya relación de dispersión es anisótropa:

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon_0 - 2t_x \cos(k_x a) - 2t_y \cos(k_y a), \qquad (t_x \neq t_y).$$

En la Fig. 1 se muestran curvas de energía constante en la primera zona de Brillouin.

Considere que el sistema solo está sometido a un campo magnético perpendicular, homogéneo y estacionario; de modo que las ecuaciones semiclásicas quedan

$$\dot{\mathbf{r}} = \frac{1}{\hbar}\nabla_{\mathbf{k}}\varepsilon(\mathbf{k}), \qquad \hbar\dot{\mathbf{k}} = -e\,\dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{H}, \qquad \mathbf{H} = H\,\hat{z}.$$

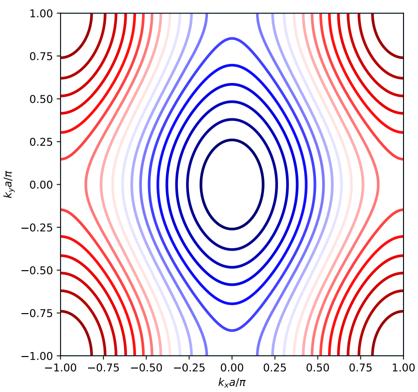

Figura 1: Curvas de nivel $\varepsilon(\mathbf{k})$ =cte en la 1ZB para una dispersión anisótropa.

Estudie el movimiento del electrón de la siguiente forma:

a) **Movimiento en el espacio k.**

Pruebe que $\varepsilon(\mathbf{k}(t))$ se conserva y concluya que la trayectoria en k queda confinada sobre una curva de nivel. Indique qué elecciones de $\mathbf{k}(0)$ llevan a **órbitas cerradas** y a **órbitas abiertas** en k, y determine el sentido de recorrido para $H > 0$.

Aclaración: **no es necesario** usar la forma explícita de $\varepsilon(\mathbf{k})$; alcanza con la geometría de las curvas de nivel de la Fig. 1 y las ecuaciones semiclásicas.

b) **Movimiento en el espacio real.**

A partir de las ecuaciones semiclásicas, demuestre que

$$\mathbf{H} \times (\hbar\dot{\mathbf{k}}) = -eH^2\,\dot{\mathbf{r}}, \qquad \mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(0) = \frac{\hbar}{eH}\hat{z} \times \big[\mathbf{k}(t) - \mathbf{k}(0)\big].$$

Use esta relación para describir la trayectoria en espacio real correspondiente a una **órbita cerrada** en k y a una **órbita abierta** en k.

5. **Frecuencia del ciclotrón.**

Si un campo magnético se aplica en la dirección $\hat{z}$, la masa efectiva de ciclotrón se define como:

$$m^\star = \left(\frac{\det(\mathbb{M})}{\hat{z}\cdot\mathbb{M}\cdot\hat{z}}\right)^{1/2} = \left(\frac{\det(\mathbb{M})}{M_{zz}}\right)^{1/2},$$

donde $\mathbb{M}$ es el tensor de masa efectiva y M_{ij} sus componentes.

a) Calcule la frecuencia de ciclotrón para los electrones en la superficie de Fermi en una banda casi vacía

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = -\left(E_1\cos k_x a + E_2\cos k_y b + E_3\cos k_z c\right).$$

b) Muestre que el resultado obtenido en *a)* es igual a la frecuencia de ciclotrón de electrones libres de masa $m^\star$.

6. **(Opcional) Oscilaciones cuánticas en un material cuasi-2D**

Un campo magnético uniforme es aplicado perpendicularmente a las capas conductoras de un material cuasi-bidimensional. La estructura cristalina de las capas es tetragonal con parámetro de red $a = 3{,}5\,\text{Å}$. La banda de energía electrónica de las capas puede describirse correctamente con un modelo de enlaces fuertes y no hay dispersión en la otra dirección.

La resistencia y otras propiedades exhiben oscilaciones cuando la intensidad del campo varía. La oscilación es periódica en $1/H$ y el período es $6{,}1 \times 10^{-8}\,\text{G}^{-1}$. ¿Cuál es la densidad de electrones de conducción (en unidades de cm^{-2}) para este material?