EL3004-Circuitos Electrónicos Analógicos

Clase No. 4: Teoría de bandas y cristales

Marcos Diaz

Departamento de Ingeniería Eléctrica (DIE)
Universidad de Chile

6 de agosto de 2009

Repaso Clase #3

- Estructura electronica de los átomos
  - El átomo de Hidrogeno
  - Spin y el principio de exclusión
- Electrones en solidos: Teoría de bandas

Teorema de Bloch

Consideremos una cadena de N átomos espaciados a intervalos de periodo *a*.

- La energía potencial tiene la misma periodicidad:

$$U(x) = U(x+a) = U(x+2a) = \dots$$

- La función de onda (F.O.) debe tener la misma periodicidad:

$$\Psi(x+a) = C\Psi(x)$$

- Se considera que la cadena forma un anillo:

$$\Psi(x+Na) = \Psi(x) = C^N\Psi(x)$$

$$\Rightarrow C^N = 1 \Rightarrow C = e^{j2\pi s/N}; \quad s = 1, 2, 3, \dots, N-1.$$

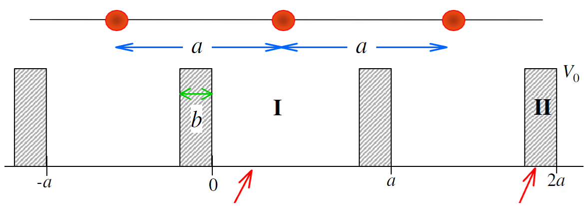
- Para satisfacer la relación previa, la F.O. tiene que ser de la forma:

$$\Psi(x) = u_k(x)e^{jkx} \quad \text{con} \quad u_k(x) = u_k(x+a) \text{ y } k = 2\pi s/Na \tag{85}$$

Esto corresponde a una onda plana modulada en espacio.

Modelo de Kronig-Penney

Consideremos una cadena de N átomos espaciados a intervalos de periodo *a*.



$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \beta^2\Psi = 0 \qquad (86)$$

$$\beta^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \qquad (87)$$

$$\Psi_I = Ae^{j\beta x} + Be^{-j\beta x} \qquad (88)$$

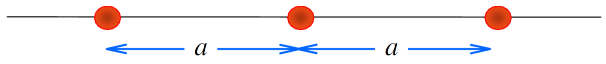
$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \alpha^2\Psi = 0 \qquad (89)$$

$$\alpha^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} \qquad (90)$$

$$\Psi_{II} = Ce^{\alpha x} + De^{-\alpha x} \qquad (91)$$

Modelo de Kronig-Penney

Consideremos una cadena de N átomos espaciados a intervalos de periodo *a*.



- Por continuidad de Ψ y $d\Psi/dx$ en $x = 0$

$$A + B = C + D \qquad (92)$$

$$j\beta(A - B) = \alpha(C - D) \qquad (93)$$

- Del teorema de Bloch, $\Psi(x + a) = \Psi(x)e^{jka}$ en $x = -b$:

$$Ae^{j\beta(a-b)} + Be^{-j\beta(a-b)} = (Ce^{j\alpha(-b)} + De^{-j\alpha(-b)})e^{jka} \qquad (94)$$

$$j\beta(Ae^{j\beta(a-b)} - Be^{-j\beta(a-b)}) = \alpha(Ce^{j\alpha(-b)} - De^{-j\alpha(-b)})e^{-jka} \qquad (95)$$

Modelo de Kronig-Penney

$$\mathbf{Mv} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ j\beta & -j\beta & -\alpha & \alpha \\ e^{j\beta(a-b)} & e^{-j\beta(a-b)} & -e^{-j(\alpha b-ka)} & -e^{j(\alpha b+ka)} \\ j\beta e^{j\beta(a-b)} & -j\beta e^{-j\beta(a-b)} & -\alpha e^{-j(\alpha b+ka)} & \alpha e^{j(\alpha b-ka)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A \\ B \\ C \\ D \end{bmatrix} = 0$$

- El sistema de ecuaciones formado por las Ec. 92 a la Ec. 95 tiene solución si su determinante es igual a cero, lo cual da:

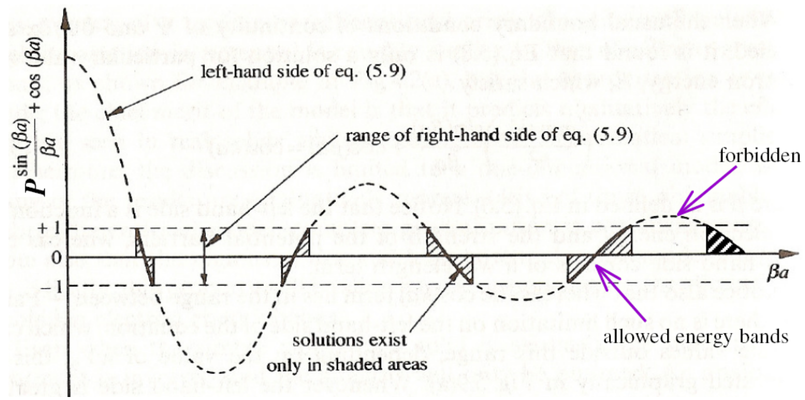
$$\frac{\alpha^2 - \beta^2}{2\alpha\beta} sinh(\alpha b)sin(\beta[a - b]) + cosh(\alpha b)cos(\beta[a - b]) = cos(ka) \qquad (96)$$

- Por simplicidad concideremos el caso cuando $b \to 0$ y $V_0 \to \infty$ pero tal que $\alpha^2 ba/2 = P$ permanece contante.
- En este límite $\alpha \gg \beta$ y $\alpha b \ll 1$. Entonces:

$$P\frac{sin(\beta a)}{\beta a} + cos(\beta a) = cos(ka) \qquad (97)$$

Modelo de Kronig-Penney

La pregunta ahora es:¿Cules son la energías ($E = \hbar\beta^2/2m$) permitidas del electrón? Es posible resolver esta pregunta de manera gráfica:

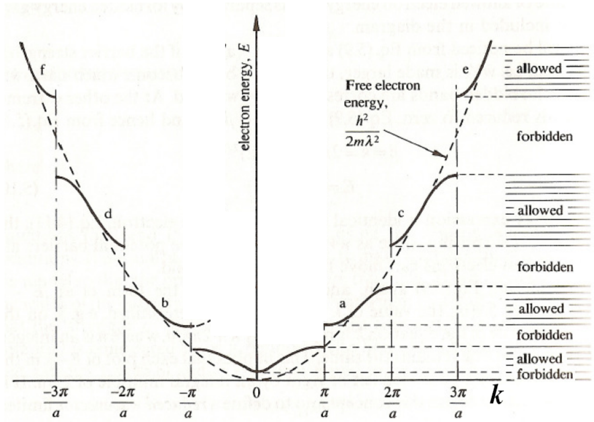


- Cuando se aumenta P (es decir el producto bV_0), las bandas pasan a ser más angostas.
- Si $P \to 0$, entonces $\beta \to k$. Es equivalente al modelo de electrón libre.

Modelo de Kronig-Penney

$$P\frac{sin(\beta a)}{\beta a} + cos(\beta a) = cos(ka) \quad (98)$$

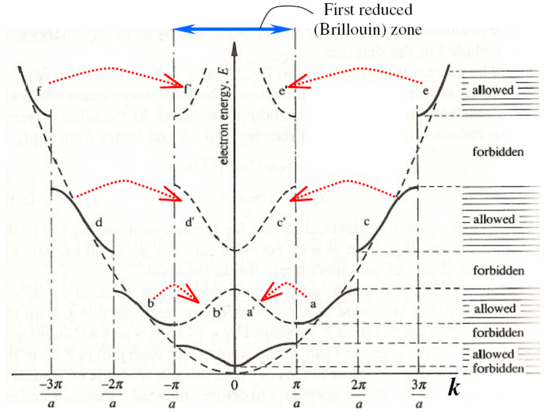
- Las energías permitidas dependen de k.
- Las soluciones tienen periodo de $cos(ka)$.



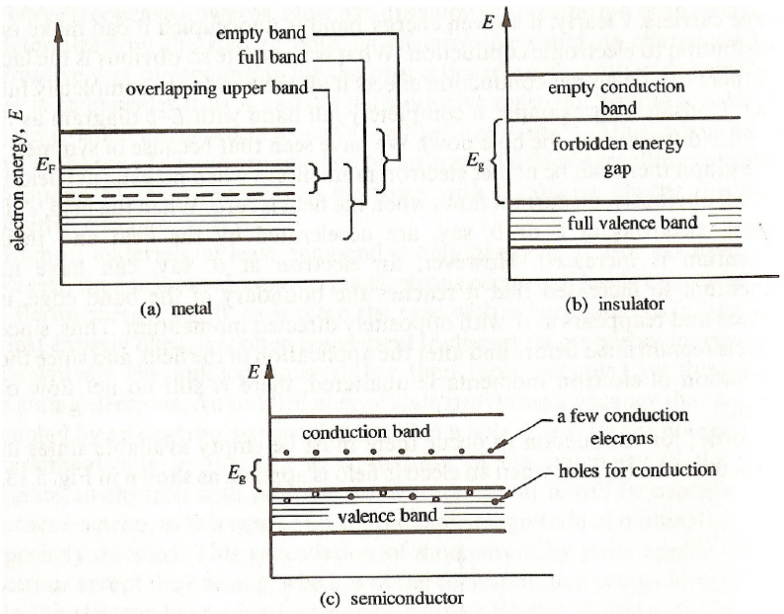
Modelo de Kronig-Penney

$$P\frac{sin(\beta a)}{\beta a} + cos(\beta a) = cos(ka) \quad (99)$$

- Las energías permitidas dependen de k.
- Las soluciones tienen periodo de $cos(ka)$.
- Una forma más clara de verlo:



Bandas de energía



Resumen Clase #3

- Teorema de Bloch
- Modelo Kronig-Penney
- Interpretación a bandas de energía