

EL3004-Circuitos Electrónicos Analógicos

Clase No. 3: Teoría de bandas y cristales

Marcos Diaz

Departamento de Ingeniería Eléctrica (DIE)
Universidad de Chile

Septiembre, 2011

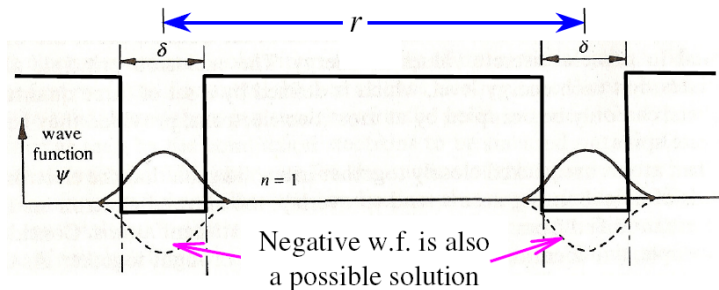
- 1 Repaso Clase #2
- 2 Electrones en solidos: Teoría de bandas
- 3 Electrones en solidos: Teoría de bandas
 - Teorema de Bloch
 - Modelo de Kronig-Penney
- 4 Resumen Clase #3

Repaso Clase #2

- La ecuación de Schrodinger
- Interpretación de la función de onda
- El Principio de Incertidumbre
- Estructura electronica de los átomos
 - Particula en un pozo potencial unidimensional
 - El átomo de Hidrogeno
 - Spin y el principio de exclusión

Electrones en sólidos

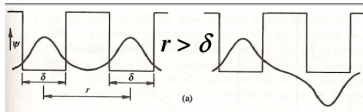
Dos átomos separados una distancia r modelados por pozos potenciales. Si r es suficientemente grande la función de onda de cada átomo permanece inalterada.



$$E_n = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2m_e d^2} = \frac{n^2 h^2}{8m_e d^2} \quad E_1 = \frac{h^2}{8m_e d^2} \quad (66)$$

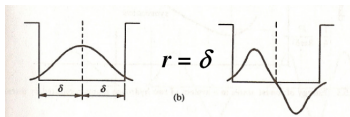
Electrones en sólidos

Ahora los átomos son acercados.



$$E_{1,\text{sim}} = \frac{h^2}{8m_e(2\delta)^2}$$

$$= \frac{1}{4} \frac{h^2}{8m_e\delta^2}$$

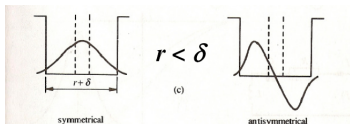


$$E_{1,\text{anti}} = \frac{2^2 h^2}{8m_e(2\delta)^2}$$

$$= \frac{h^2}{8m_e\delta^2}$$

pozo con $n = 2$

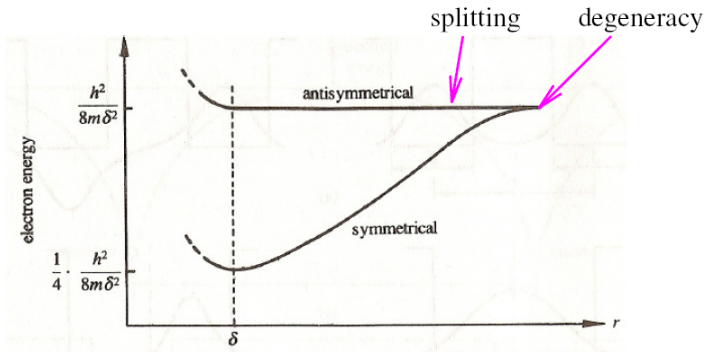
$$E_{1,\text{sim}} = \frac{h^2}{8m_e(r+\delta)^2}$$



$$E_{1,\text{anti}} = \frac{2^2 h^2}{8m_e(r+\delta)^2}$$

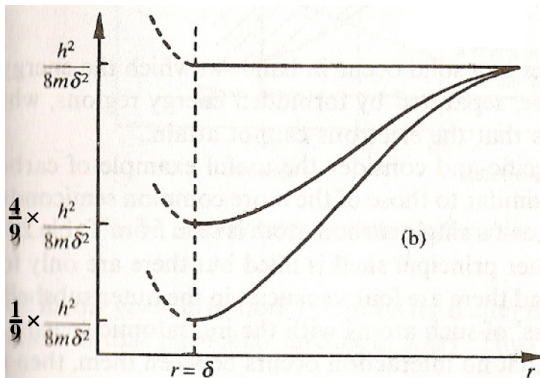
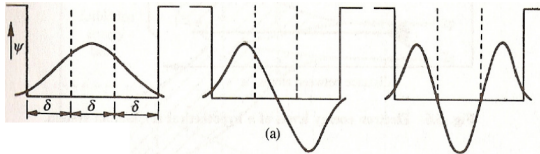
Electrones en sólidos

Dos átomos separados una distancia r modelados por pozos potenciales



Electrones en sólidos

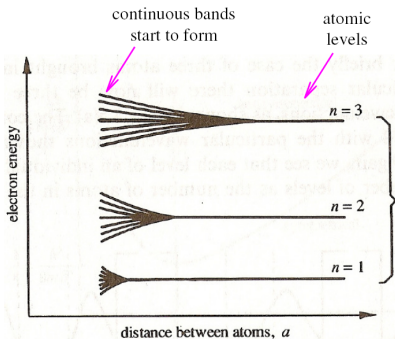
Tres átomos separados una distancia r modelados por pozos potenciales



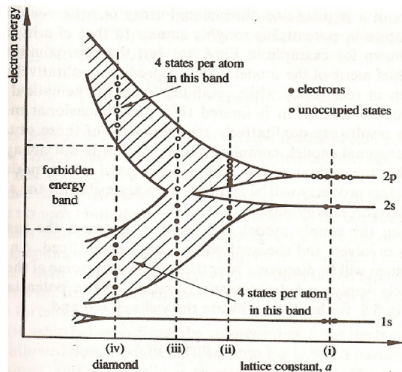
Electrones en sólidos

Bandas de Energías permitidas

Más átomos son puestos
adyacentes

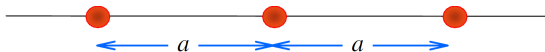


Ejemplo: Carbono



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:

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

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

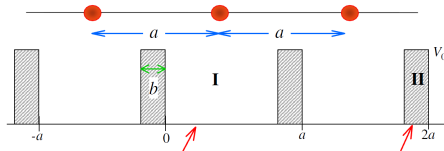
- Para satisfacer la relación previa, la F.O. tiene que ser de la forma:

$$\Psi(x + a) = e^{jka} \Psi(x), \quad u_k(x) \equiv e^{-jkx} \Psi(x) \Rightarrow u_k(x) = u_k(x + a) \text{ y } k = 2\pi s/Na \quad (67)$$

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 .



$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \beta^2 \psi = 0 \quad (68)$$

$$\beta^2 = \frac{2m_e E}{\hbar^2} \quad (69)$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \alpha^2 \psi = 0 \quad (71)$$

$$\alpha^2 = \frac{2m_e (V_0 - E)}{\hbar^2} \quad (72)$$

$$\frac{d^2 u_1}{dx^2} + 2jk \frac{du_1}{dx} + (\beta^2 - k^2) u_1 = 0 \quad (70) \quad \frac{d^2 u_2}{dx^2} + 2jk \frac{du_2}{dx} + (\alpha^2 + k^2) u_2 = 0 \quad (73)$$

Donde se asumió que $\psi_m(x) = e^{ikx} u_m(x)$ (Bloch), donde $m = 1, 2$ y $u_m(x)$ tiene la periodicidad del arreglo.

Modelo de Kronig-Penney

Las soluciones de estas ecuaciones son:

$$u_1 = Ae^{-j(k-\beta)x} + Be^{-j(k+\beta)x} \quad 0 < x < a \quad (74)$$

$$u_2 = Ce^{-j(k-\alpha)x} + De^{-j(k+\alpha)x} \quad -b < x < 0. \quad (75)$$

Por continuidad, $u_1(0) = u_2(0)$, $u_1(a) = u_2(-b)$, $du_1(0)/dx = du_2(0)/dx$ y $du_1(a)/dx = du_2(-b)/dx$

$$A + B - C - D = 0 \quad (76)$$

$$Ae^{j(k-\beta)a} + Be^{-j(k+\beta)a} - Ce^{j(k-\alpha)b} - De^{j(k+\alpha)b} = 0 \quad (77)$$

$$-j(k-\beta)A - j(k+\beta)B + (jk-\alpha)C + (jk+\alpha)D = 0 \quad (78)$$

$$-j(k-\beta)Ae^{j(k-\beta)a} - j(k+\beta)Be^{-j(k+\beta)a} + (jk-\alpha)Ce^{j(k-\alpha)b} + (jk+\alpha)De^{j(k+\alpha)b} = 0 \quad (79)$$

Matricialmente

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

Modelo de Kronig-Penney

- El sistema de ecuaciones formado por las Ec. 76 a la Ec. 79 tiene solución no trivial ($A \neq 0$, $B \neq 0$, $C \neq 0$ y $D \neq 0$) cuando el determinante de la matriz $\mathbf{M}$ es cero, Así:

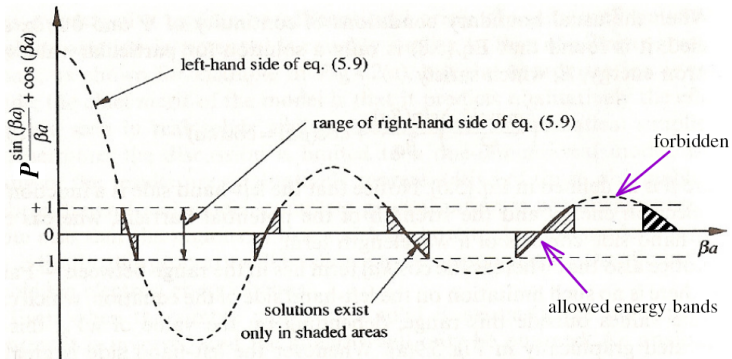
$$\frac{\alpha^2 - \beta^2}{2\alpha\beta} \sinh(\alpha b) \sin(\beta[a - b]) + \cosh(\alpha b) \cos(\beta[a - b]) = \cos(ka) \quad (80)$$

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

$$P \frac{\sin(\beta a)}{\beta a} + \cos(\beta a) = \cos(ka) \quad (81)$$

Modelo de Kronig-Penney

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

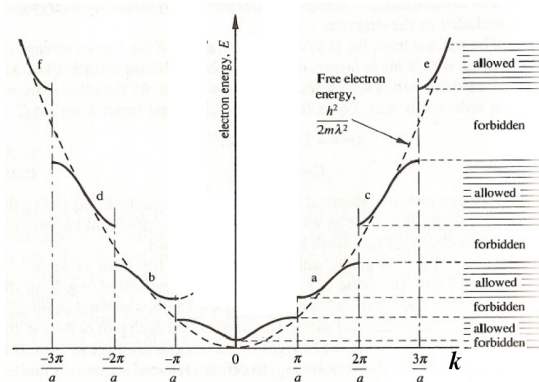


- Cuando se aumenta P (es decir el producto bV_0), las bandas pasan a ser más angostas.
- Si $P \rightarrow 0$, entonces $\beta \rightarrow k$. Es equivalente al modelo de electrón libre.

Modelo de Kronig-Penney

$$P \frac{\sin(\beta a)}{\beta a} + \cos(\beta a) = \cos(ka) \quad (82)$$

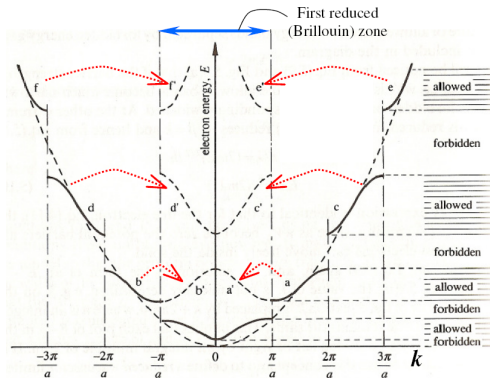
- Las energías permitidas dependen de k .
- Las soluciones tienen periodo de $\cos(ka)$.



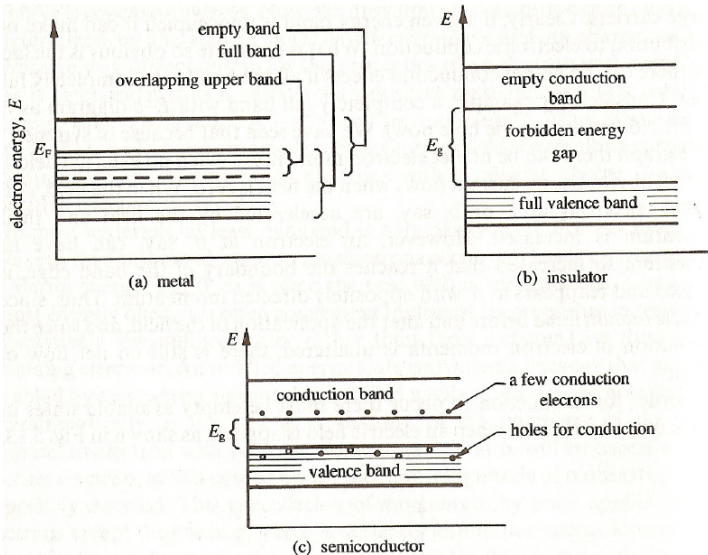
Modelo de Kronig-Penney

$$P \frac{\sin(\beta a)}{\beta a} + \cos(\beta a) = \cos(ka) \quad (83)$$

- 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

- Electrones en solidos
 - Teorema de Bloch
 - Modelo de Kronig-Penney
 - Interpretación de bandas de energía