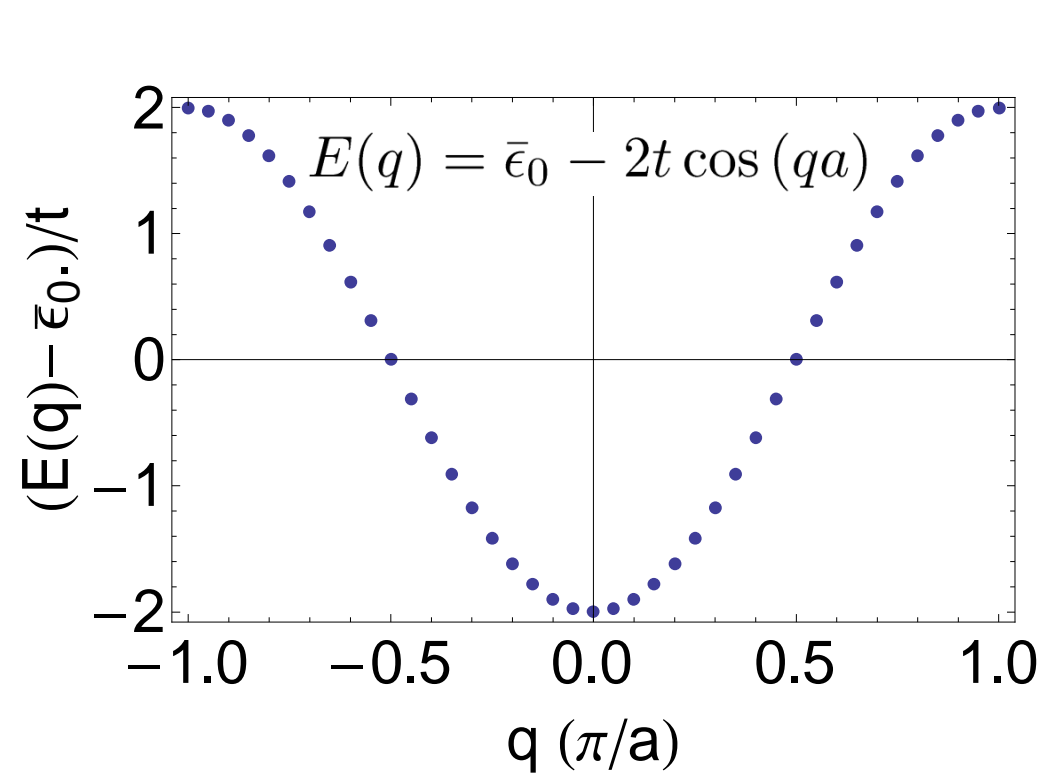
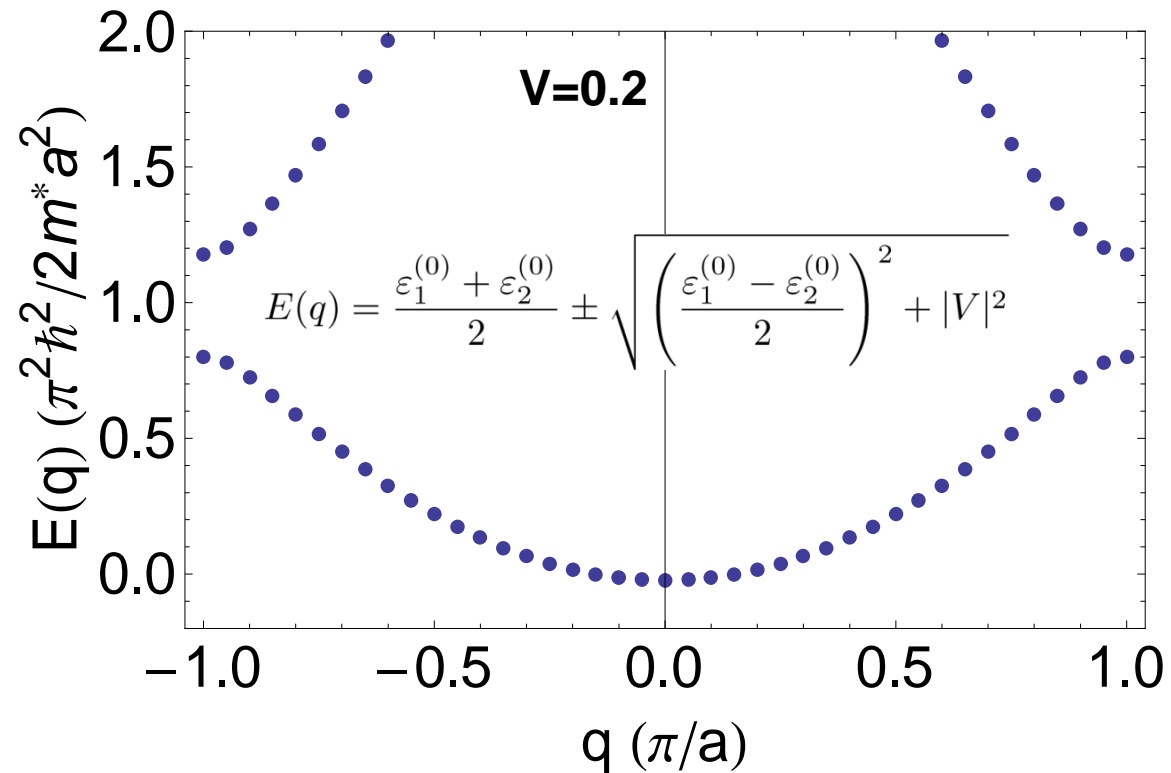


# Tight-binding vs gás de elétrons quase livres



$$E(q \approx 0) = (\bar{\epsilon}_0 - 2t) + ta^2 q^2$$



$$E(q \approx 0) = \left(\frac{\hbar^2}{2m^*}\right) q^2$$

- Ambos são parabólicos próximos de  $q=0$  e  $q=\pm \pi/a$  (Lista 3).

# Momento cristalino

- Momento cristalino  $\hbar \mathbf{k} = \hbar \mathbf{q} - \hbar \mathbf{G}$

- Teorema de Bloch  $\Psi_{\mathbf{q}}^{(j)}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} u_{j,\mathbf{q}}(\mathbf{r})$

- *Momento cristalino não é auto-valor de momento!*  $\hat{\mathbf{p}}\Psi_{\mathbf{q}}(\mathbf{r}) \neq \hbar \mathbf{q}\Psi_{\mathbf{q}}(\mathbf{r})$

$$\frac{\hbar}{i} \nabla \Psi_{\mathbf{q}}(\mathbf{r}) = \hbar \mathbf{q} \Psi_{\mathbf{q}}(\mathbf{r}) + e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \frac{\hbar}{i} \nabla u_{\mathbf{q}}(\mathbf{r}) \neq \hbar \mathbf{q} \Psi_{\mathbf{q}}(\mathbf{r})$$

- O momento cristalino pode ser visto como um número quântico associado à simetria de translação *do cristal*.

# Velocidade de grupo e Massa efetiva

- Velocidade de grupo dos elétrons na banda:  $\mathbf{v}_g \equiv \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{q}} E(\mathbf{q})$
- Força atuando em um elétron da banda:  $\delta E(\mathbf{q}) = \mathbf{f} \cdot \mathbf{v}_g \delta t$

$$\delta E(\mathbf{q}) = \nabla_{\mathbf{q}} E(\mathbf{q}) \cdot \frac{d\mathbf{q}}{dt} \delta t \Rightarrow \boxed{\mathbf{f} = \hbar \frac{d\mathbf{q}}{dt}}$$

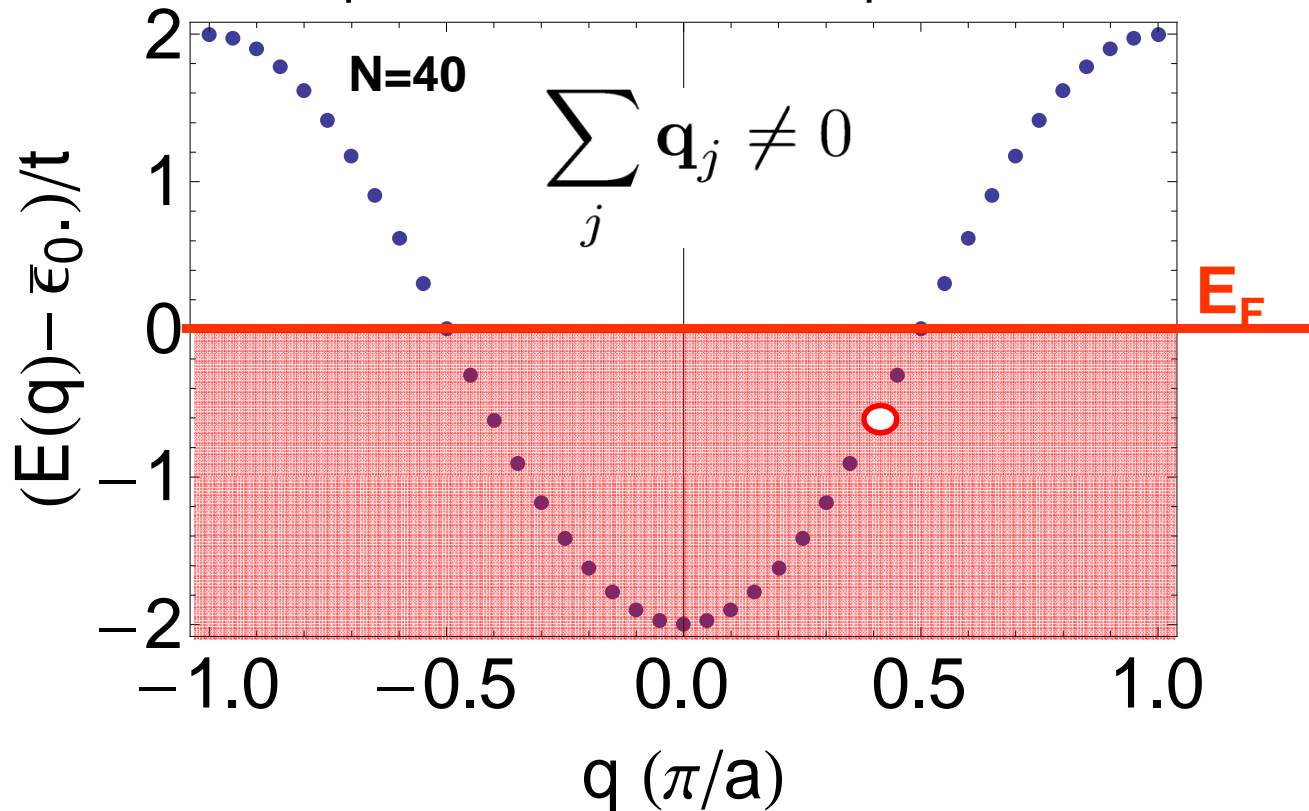
*A variação do momento cristalino é igual à força em um elétron do cristal!*

- Massa efetiva (1D):  $f := m^*(\bar{q}) \left. \frac{dv_g}{dt} \right|_{\bar{q}}$  Definição da massa efetiva

$$\frac{dv_g}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dt} \frac{dE(q)}{dq} = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2 E(q)}{dq^2} \frac{dq}{dt} \Rightarrow \boxed{m^*(\bar{q}) = \hbar^2 \left( \left. \frac{d^2 E(q)}{dq^2} \right|_{\bar{q}} \right)^{-1}}$$

# Buracos

1 e- por sítio: banda semi-preenchida.



- Massa efetiva:

$$m_h^* = m^*(\mathbf{q}_\ell)$$

- Velocidade:

$$\mathbf{v}_h = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{q}_h} E_h(\mathbf{q}_h) = \mathbf{v}_\ell$$

- Se um elétron é excitado, criamos um *buraco* na banda.

- O buraco tem um  $\mathbf{q}$  não nulo:

$$\mathbf{q}_h = \sum_{j \neq \ell} \mathbf{q}_j = -\mathbf{q}_\ell$$

- Variação de Energia:

$$\Delta E_h = -E(\mathbf{q}_\ell)$$

- Corrente (carga positiva):

$$\sum_{j \neq \ell} (-e) \mathbf{v}_j = -(-e) \mathbf{v}_\ell = +e \mathbf{v}_h$$