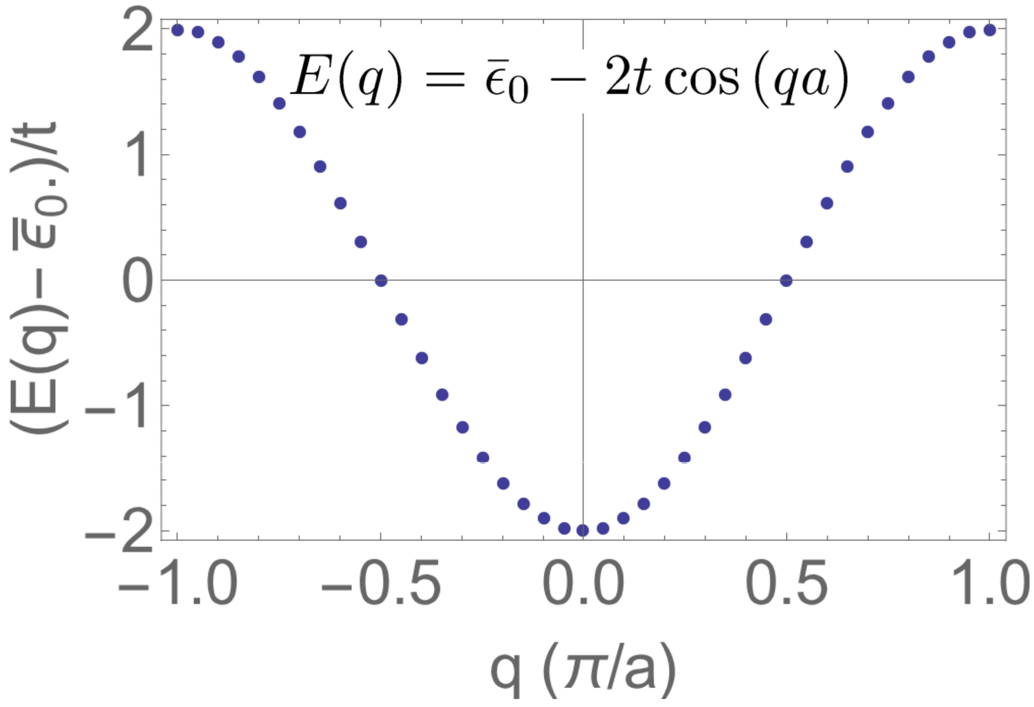
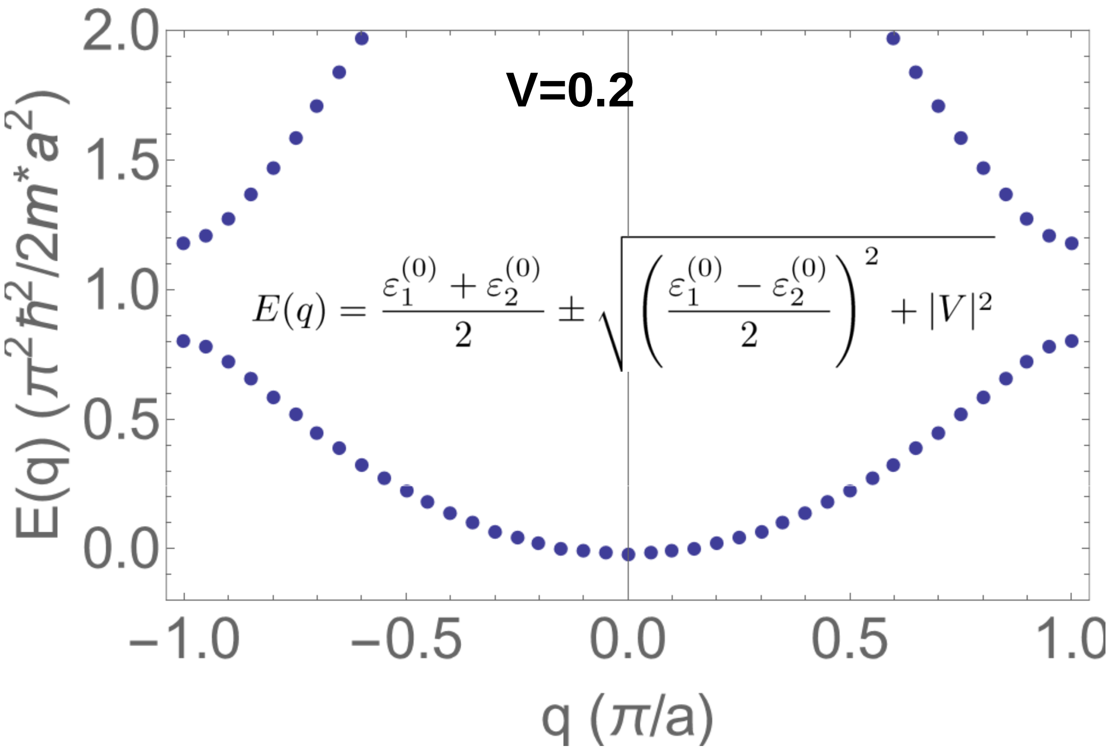
Tight-binding vs gás de elétrons quase livres





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

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

- Ambos são parabólicos próximos de q=0 e q=± π/a.

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!* $\hat{\mathbf{p}}\Psi_{\mathbf{q}}(\mathbf{r}) \neq \hbar \mathbf{q}\Psi_{\mathbf{q}}(\mathbf{r})$

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

- 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: $\delta E(\mathbf{q}) = \mathbf{f}\cdot\mathbf{v}_g\delta t$

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

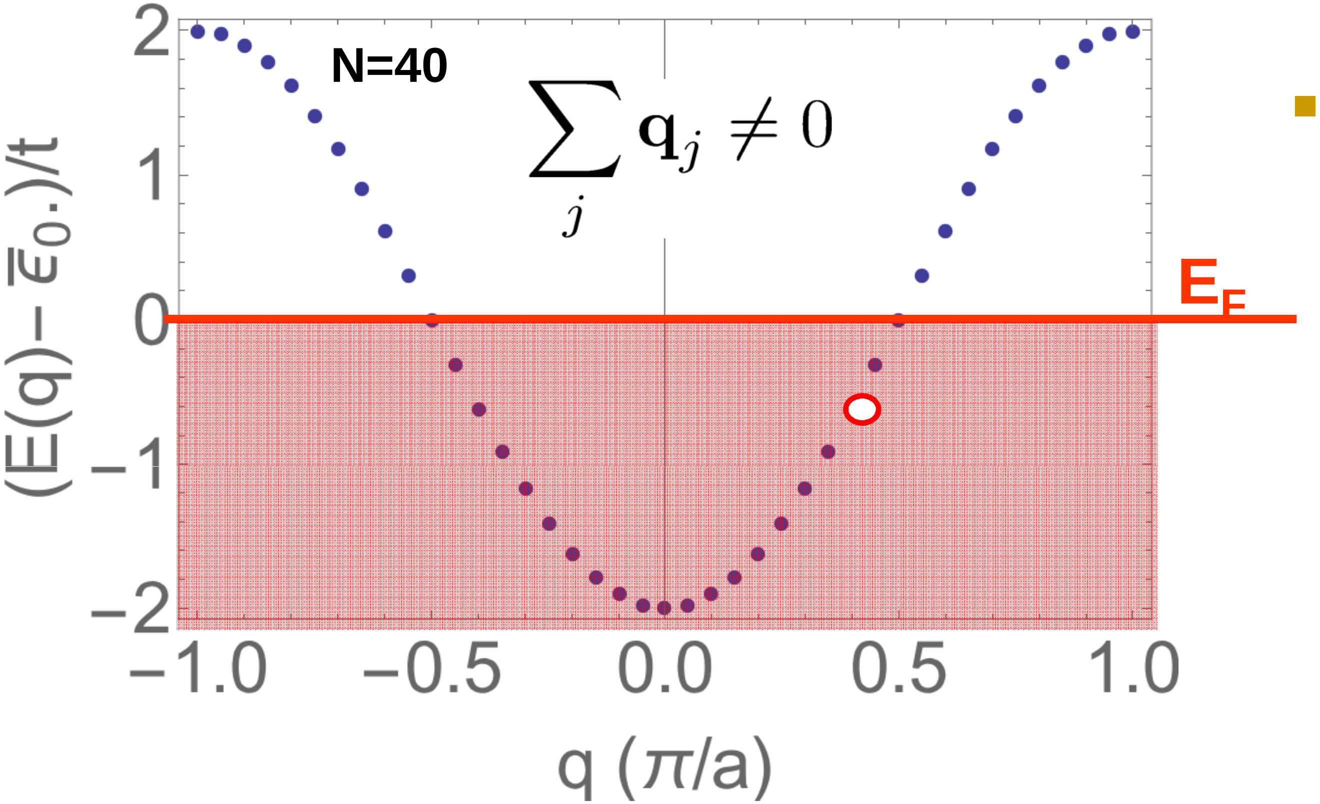
A variação do momento cristalino é igual à força em um elétron do cristal!

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

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

Buracos

1 e- por sítio: N_e=N.



- Se um elétron é retirado (N_e=N-1), criamos um *buraco* na banda.

- O buraco tem um 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):

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

- Massa efetiva:

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

- Velocidade:

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