BANDAS DE ENERGIA en SOLIDOS

MODELO de KRONIG-PENNEY

Dr. Andres Ozols

Noviembre 2004

MODELO ANALITICO DE BANDAS DE ENERGÍA

Las hipótesis del modelo son:

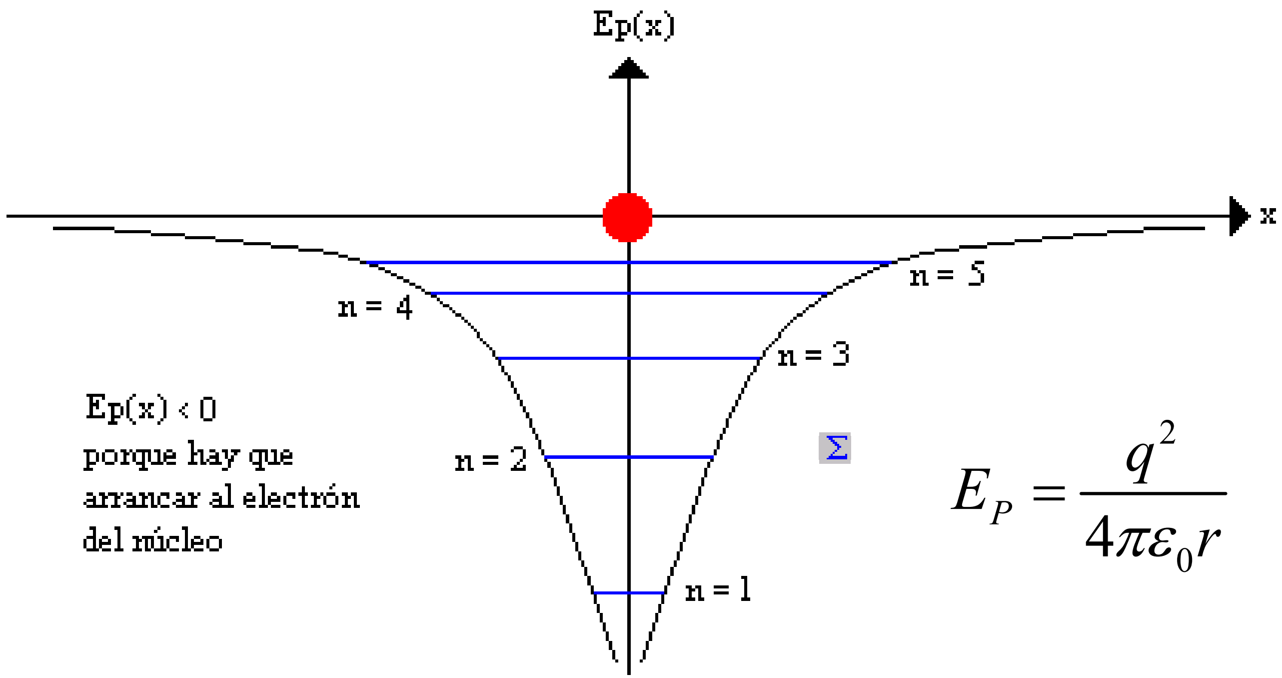
-El electrón en el cristal es una partícula libre, con una *masa efectiva*. Esta contiene la información sobre la interacción media con otros electrones, iones, defectos cristalinos, fonones y otros entes dispersivos.

-El potencial de interacción con los iones es periódico.

-La energía potencial del cristal es periódica.

-La interacción con los núcleos atómicos es de corto alcance. Está decae muy rápidamente al alejarse.

MODELO BANDAS DE ENERGÍA



Niveles de energía próximos al ión en un potencial coulumbiano

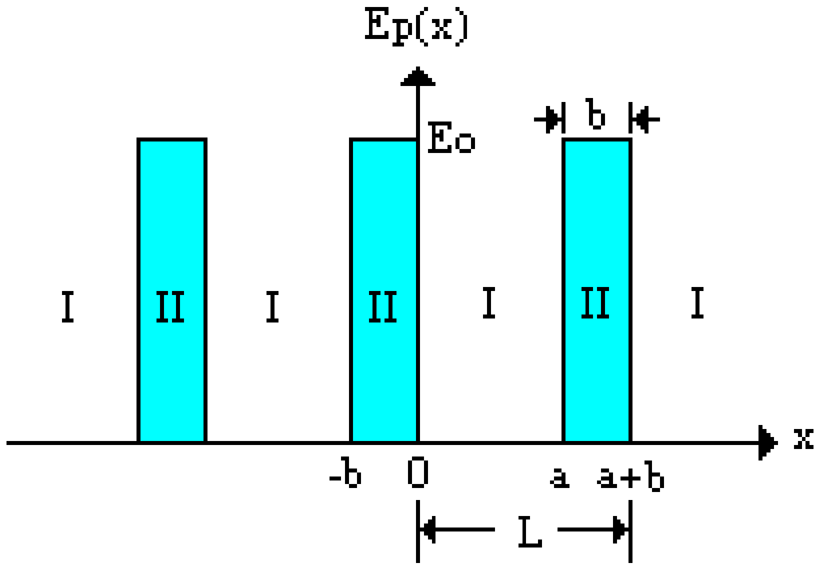
$$E_P = \frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

-Principio de Exclusión de Pauli: dos electrones con spin diferente no pueden ocupar el mismo nivel de energía.

•Los niveles de energía en el sólido forman bandas de energía.

MODELO DE KRONIG – PENNEY

Este modelo describe el movimiento de un solo electrón en la una red cristalina periódica unidimensional. Este atraviesa en forma dos tipos de regiones en forma alternada:



región I $E_p = 0$

región II $E_p = E_0$

Ese movimiento de la partícula esta descripto por la Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo:

$$E_P - E_C = \frac{\hbar^2}{2m\psi(x)} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2}$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + (E_P - E_C)\psi(x) = 0$$

MODELO DE KRONIG – PENNEY

- El potencial del cristal describe por medio la función periódica:

***u(x)* (*función de Bloch periódica*)**

- La función onda $\psi\,(x)$ tiene una amplitud modulada en x:

$$\psi\,(x) = u(x)\, e^{jKx}$$

DETERMINACION DE LAS FUNCIONES DE BLOCH

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - E_P)\psi(x)$$

ONDA
REGION I $E_P = 0$

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x)$$

DETERMINACION DE LAS FUNCIONES DE BLOCH

$$\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - E_P)\psi(x)$$

REGION I $E_P = 0$

$$\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x)$$

Si

$$\alpha^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \qquad \psi_I(x) = u_I(x)e^{jKx}$$

$$\frac{\partial^2\psi_I(x)}{\partial x^2} = -\alpha^2 u_I(x)e^{jKx}$$

DETERMINACION DE LAS FUNCIONES DE BLOCH

Desarrollando las derivadas

$$\frac{\partial \psi_I(x)}{\partial x} = \frac{\partial [u_I(x) e^{jKx}]}{\partial x}$$

$$\frac{\partial \psi_I(x)}{\partial x} = jKu_I(x)e^{jKx} + \frac{\partial [u_I(x)]}{\partial x} e^{jKx}$$

$$\frac{\partial^2 \psi_I(x)}{\partial x^2} = jK\frac{\partial [u_I(x)]}{\partial x} e^{jKx} - Ku_I(x)e^{jKx} + \frac{\partial^2 [u_I(x)]}{\partial x^2} e^{jKx} + jK\frac{\partial [u_I(x)]}{\partial x} e^{jKx}$$

$$\frac{\partial^2 [u_I(x)]}{\partial x^2} e^{jKx} + 2jK\frac{\partial [u_I(x)]}{\partial x} e^{jKx} - K^2 u_I(x)e^{jKx} = -\alpha^2 u_I(x)e^{jKx}$$

$$\frac{\partial^2 [u_I(x)]}{\partial x^2} e^{jKx} + 2jK\frac{\partial [u_I(x)]}{\partial x} e^{jKx} - (K^2 - \alpha^2) u_I(x)e^{jKx} = 0$$

DETERMINACION DE LAS FUNCIONES DE BLOCH

REGION II $E_P = E_0$

$$\frac{\partial^2 \psi_{II}(x)}{\partial x^2} = -\frac{2m[E - E_0]}{\hbar^2}\psi_{II}(x)$$

Si

$$\beta^2 = \frac{2m[E_0 - E]}{\hbar^2} \qquad \psi_{II}(x) = u_{II}(x)\, e^{jKx}$$

$$\frac{\partial^2 \psi_{II}(x)}{\partial x^2} = \frac{\partial^2}{\partial x^2}(u_{II}(x)e^{jKx})$$

Análogamente a los desarrollos con la región I:

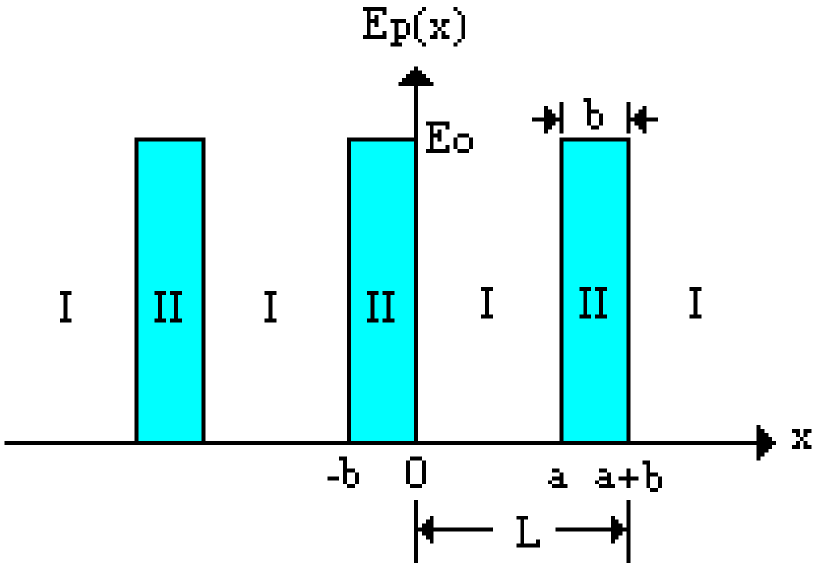
$$\frac{\partial^2 [u_{II}(x)]}{\partial x^2} e^{jKx} + 2jK\frac{\partial [u_{II}(x)]}{\partial x} e^{jKx} - (K^2 - \beta^2)u_{II}(x)e^{jKx} = 0$$

DETERMINACION DE LAS FUNCIONES DE BLOCH

Las soluciones de la ecuaciones:

$$u_I(x) = Ae^{j(\alpha-K)x} + Be^{-j(\beta+K)x}$$

$$u_{II}(x) = Ce^{j(\alpha-K)x} + De^{-j(\beta+K)x}$$



Las condiciones de contorno:

x =0

$$u_I(0) = u_{II}(0)$$

$$\left.\frac{du_I(x)}{dx}\right|_{x=0} = \left.\frac{du_{II}(x)}{dx}\right|_{x=0}$$

X =a y x=-b

$$u_I(a) = u_{II}(-b)$$

$$\left.\frac{du_I(x)}{dx}\right|_{x=a} = \left.\frac{du_{II}(x)}{dx}\right|_{x=-b}$$

DETERMINACION DE LAS FUNCIONES DE BLOCH

Al resolver estas ecuaciones se obtiene un sistema de 4 ecuaciones de 4 incógnitas que conducen a la ecuación:

$$\frac{\beta^2-\alpha^2}{2\alpha\beta} sh(\beta b) sen(\alpha a) + ch(\beta b)\cos(\alpha a) = \cos[K(a+b)]$$

$E < E_0$

1.- El 1er miembro es una relación trigonométrica.
2.- El 2do miembro es una función armónica válida entre + 1 y –1.
3.- El 1er miembro puede dar valores mayores que 1.

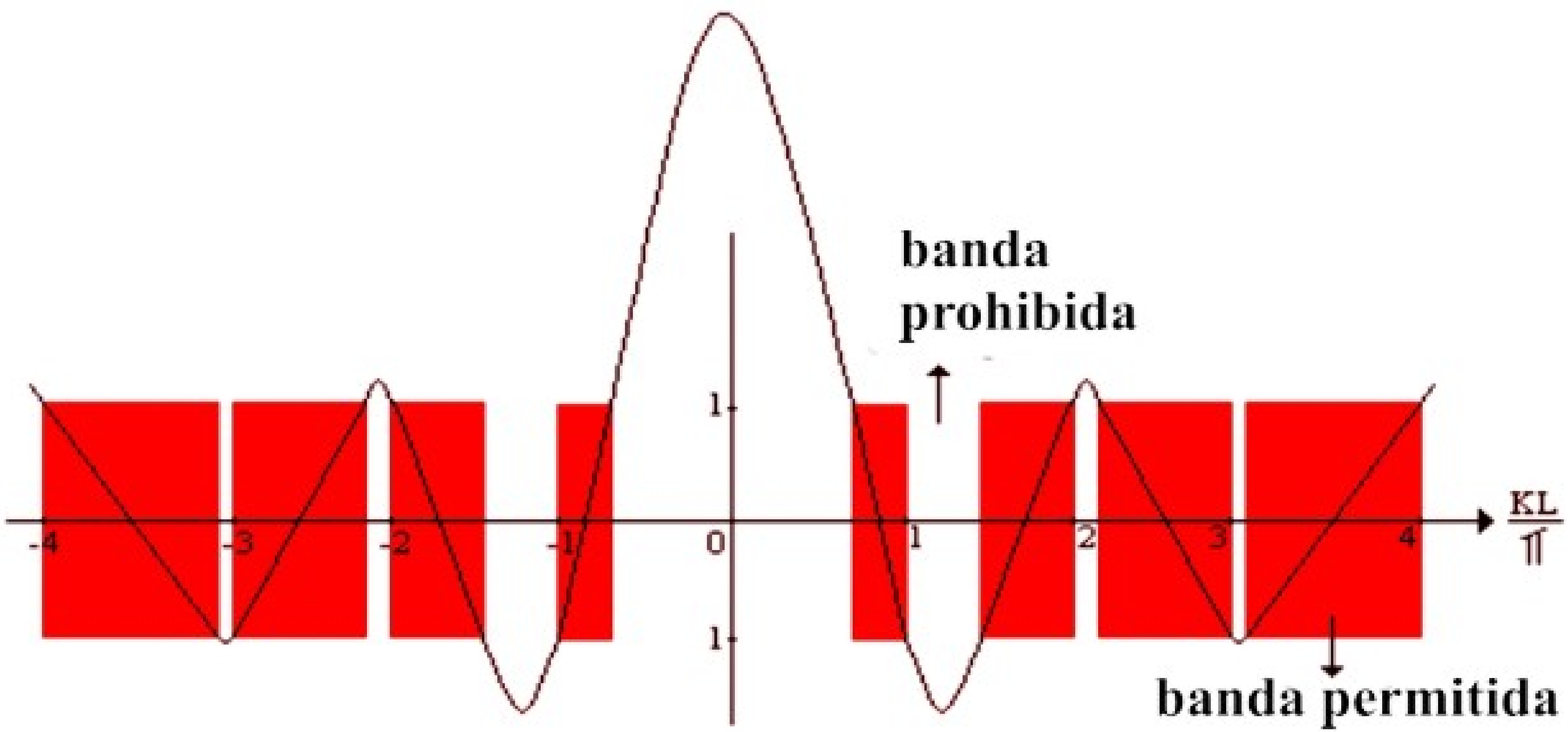
Además, K está cuantificado por las condiciones del Teorema de Bloch:

$$K = \frac{2\pi n}{N(a+b)}$$

N nº de átomos

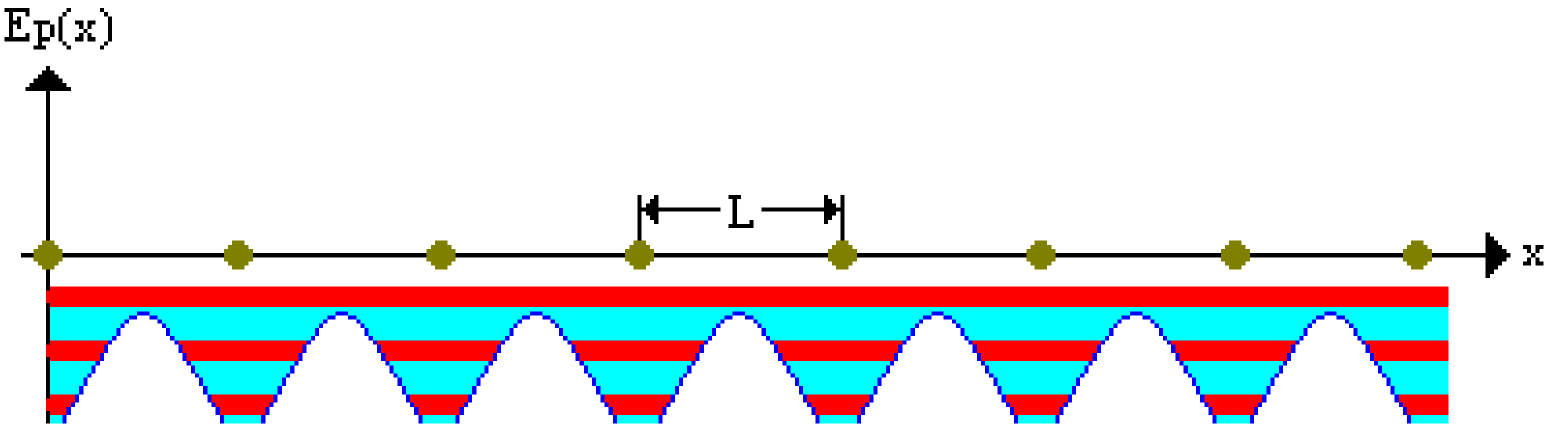
(a+b) parámetro de red

DETERMINACION DE LAS BANDAS DE ENERGIA



Se obtienen bandas de energía permitidas y prohibidas.

MODELO DE KRONIG – PENNEY

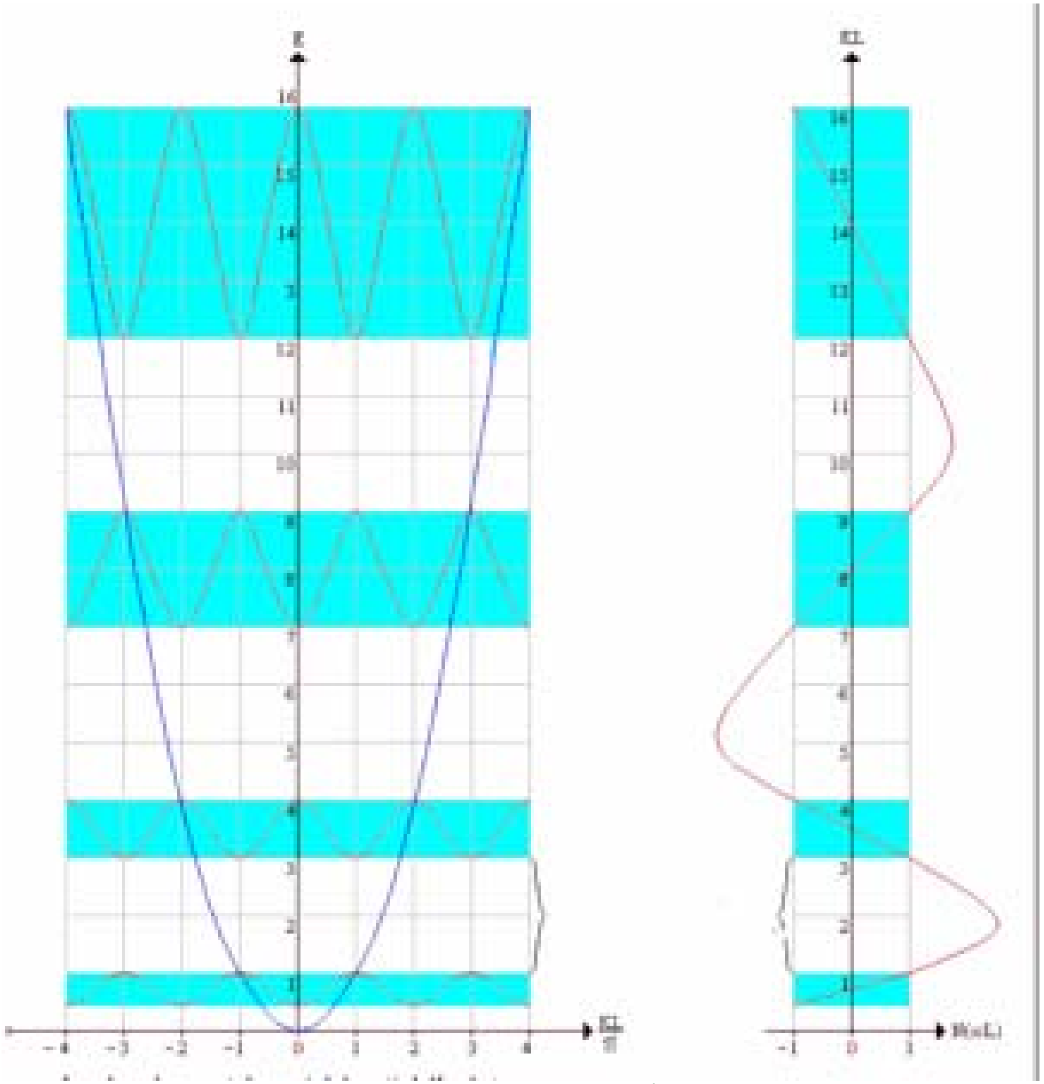


bandas prohibidas

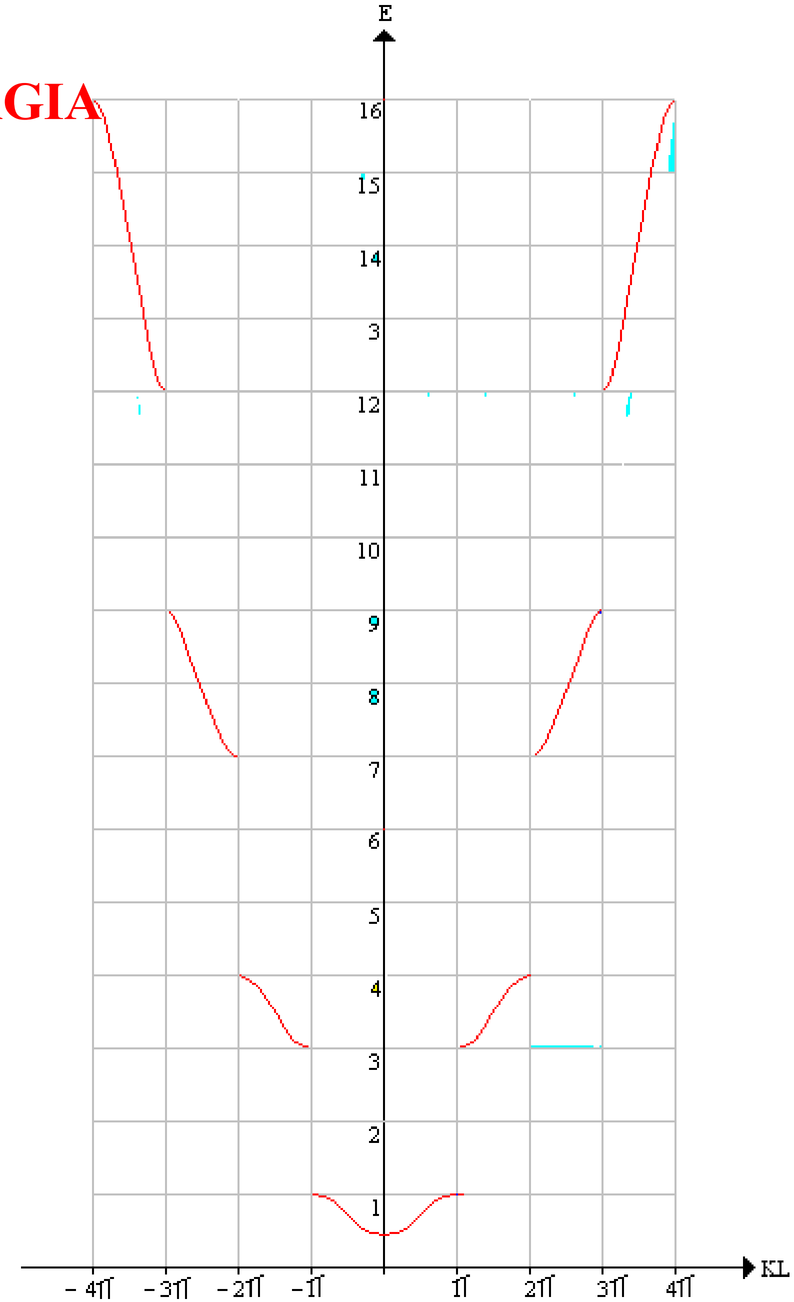
bandas de energía permitidas

Las curvas azules resultan de la superposición de los niveles de energía.
Al estar los electrones unos muy cerca de otros, los niveles de energía se desdoblan en bandas de energía y zonas prohibidas.

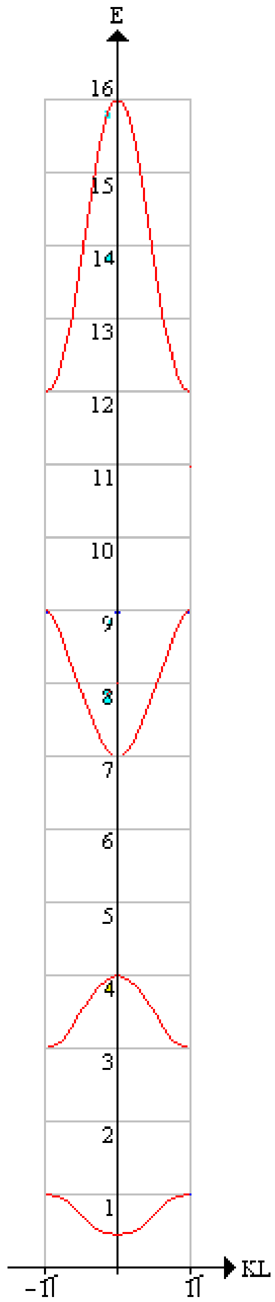
BANDAS de ENERGIA



BANDAS de ENERGIA



Representación expandida



Representación reducida