REVISTA CUBANA DE FÍSICA Vol. IX, No, 1, 1989

La masa efectiva en un problema 1D periódico de Schrodinger en la aproximación cuasiclásica

H. Rodríguez Coppola y R. Pérez Alvarez
Departamento de Física Teórica, Universidad de La Habana

RESUMEN

Se deriva la masa efectiva de un electrón moviéndose en un potencial unidimensional periódico en la aproximación cuasiclásica con masa constante y masa dependiente de la posición y se obtiene coincidencia con la expresión obtenida en un análisis clásico.

ABSTRACT

The effective mass of an electron moving in a one-dimensional periodical potential is obtained in the quasiclassical approximation with constant and position-dependent mass. The obtained expression is coincident with the one obtained in a classical analysis.

1. INTRODUCCIÓN

La masa efectiva es un concepto básico de la Física del Estado Sólido. Este concepto surge en el análisis del movimiento de los electrones en el sólido cuando, hecha la aproximación de una banda [1], se sustituye el potencial de la red cristalina y el electrón que se mueve, por una nueva *partícula libre* que tiene un movimiento con parámetros similares a los del electrón en el sólido sometido al potencial cristalino.

La masa efectiva se deriva en forma sencilla empleando diferentes modelos simples como los de electrón cuasi-libre, electrón cuasi-ligado y otros (Ver por ejemplo [2,3]). Tal parece que dicho concepto correspondería a una característica mecano-cuántica de la descripción de los electrones en el sólido, sin embargo recientemente [4] se comprobó, tanto matemáticamente como mediante una demostración experimental docente, que el concepto de masa efectiva se puede introducir en un marco clásico, pues realmente corresponde a cierto *promedio* del movimiento del electrón para considerarlo como *partícula libre* en el sólido.

Este hecho nos motivó el estudio de la masa efectiva en la aproximación cuasiclásica de un potencial periódico arbitrario unidimensional.

En este trabajo presentamos la derivación cuasiclásica de la masa efectiva de un electrón moviéndose en un potencial periódico y su generalización cuando nos encontramos con una masa dependiente de la posición, como es el caso de materiales no homogéneos [5-6], para los cuales se ha derivado una ecuación para el movimiento del electrón en una banda suficientemente aislada que corresponde a una de Schrödinger unidimensional estacionaria con masa dependiente de la posición.

2. MASA EFECTIVA EN LA APROXIMACIÓN CUASICLÁSICA

Consideremos un problema periódico como el de la figura donde suponemos que el potencial tiene un comportamiento suave (sin saltos) en la celda unitaria, al igual que la masa.

Es conocido [7] que la relación de dispersión que determina la ley de variación de la energía con el cuasivector de onda del problema periódico, empleadndo el método de la matriz de transferencia (TM) para el cálculo es:

$$\cos qd = (1/2)\,\mathrm{Sp}\{M(x+d,x)\} \qquad (1)$$

donde la celda unitaria tiene longitud d y M(x+d,x) es la matrix 2x2 que transfiere la función de onda y su derivada de un punto cualquiera (x) de la celda unitaria hasta aquel (x+d) donde se repite la forma de la celda elemental.

En la aproximación cuasiclásica la TM correspondiente a una celda unitaria con potencial y masa de comportamiento suave y arbitrario, cuando $E>\max\{V_-(x)\}$ es [8]:

$$M(x+d,d)=\begin{bmatrix} y_{11}\cos(K(x+d,x)) & y_{12}\sin(K(x+d,x)) \\ & \\ -y_{21}\sin(K(x+d,x)) & y_{22}\cos(K(x+d,x)) \end{bmatrix} \qquad (2)$$

donde se ha empleado la siguiente notación:

$$K(x+d,x) = \int_x^{x+d} |k(z)|\,dz \qquad (3)$$

$$k(x) = \sqrt{\frac{2m(x)}{\hbar^2}\,(E-V_e(x))} \qquad (4)$$

$$V_e(x) = V(x)+\hbar^2 k_t^2/2m(x) \qquad k_t^2 = k_x^2+k_y^2 \tag{5}$$

$$y_{11}(c_2,c_1) = \sqrt{\left|\frac{k(c_1)m(c_2)}{k(c_2)m(c_1)}\right|} \qquad y_{22}(c_2,c_1) = \sqrt{\left|\frac{k(c_2)m(c_2)}{k(c_1)m(c_1)}\right|}$$

$$y_{12}(c_2,c_1) = \sqrt{\left|\frac{m(c_2)}{m(c_1)k(c_2)k(c_1)}\right|} \qquad y_{21}(c_2,c_1) = \sqrt{\left|\frac{m(c_2)k(c_2)k(c_1)}{m(c_1)}\right|} \tag{6}$$

En (6) c_2 y c_1 son cualquier par de puntos. Al aplicar (6) en (2) c_1 y c_2 son los puntos x y $x+d$ respectivamente.

Empleando (2) en (1) se tiene:

$$qd = K(x+d,x)+2n\pi, \quad \text{si} \quad n=0,1,2,... \tag{7}$$

La masa efectiva se define como [1]:

$$m^* = \frac{\hbar^2}{E''(q)} \tag{8}$$

donde las primas indican aquí derivación respecto de q.

Necesitamos entonces hallar $E''(q)$. Para ello, derivamos dos veces la relación (7). Después de algunos pasos algebraicos más, la relación (8) puede escribirse como:

$$m^* = -\frac{\hbar^2}{d^2}\,\frac{\left[\displaystyle\int_x^{x+d} \frac{dk(x)}{dE}\,dx\right]^3}{\displaystyle\int_x^{x+d} \frac{d^2k(x)}{dE^2}\,dx} \tag{9}$$

Empleando ahora la definición (4) y la notación:
$<...> = \frac{1}{d}\int_x^{x+d} ....dx$, que indica promedio en la celda unitaria, se expresa (9) en la forma:

$$m^* = \frac{\left[\left\langle\left[\dfrac{m(x)}{E-V_e(x)}\right]^{\frac{1}{2}}\right\rangle\right]^3}{\left\langle\left[\dfrac{m(x)}{(E-V_e(x))^3}\right]^{\frac{1}{2}}\right\rangle} \tag{10}$$

ecuación igual a la obtenida clásicamente [3] cuando se hace m constante.

Cuando el potencial y la masa tienen puntos de salto en el interior de la celda unitaria la expresión (10) se modifica, y se obtiene:

$$m^* = \frac{(A_1c_1 - B_1s_1)\hbar^2}{d^2 DF} \tag{11}$$

$$F = c_1[\Gamma B_1^2 - A_2] + s_1[2A_1B_1 + \Gamma B_2] - (\Gamma c_1/D)[A_1^2 c_1^2 - 2A_1B_1c_1s_1 + \Gamma^2 A_1^2 s_1^2]$$

siendo $D=1-\Gamma^2 c_1$; $A_1=d\Gamma/dE$; $B_1=dK_1/dE$; $A_2=d^2\Gamma/dE^2$; $B_2=d^2K_1/dE^2$; $c_1=\cos K_1$; $s_1=\sin K_1$; $\Gamma=(1/2)(\gamma_a+1/\gamma_a)$; y $\gamma_a=[m(a-)k(a+)/m(a+)k(a-)]^{\frac{1}{2}}$; si a es el punto de salto de la masa. La ecuación (11) se reduce a la (10) si $\Gamma=1$. Aquí $K_1=K(x+d,x)$.

3. CONCLUSIONES

Como puede verse, se ha obtenido la masa efectiva de un electrón en un movimiento periódico arbitrario empleando la aproximación cuasiclásica incluyendo la posibilidad de masa variable. Este cálculo, que resulta sencillo, puede utilizarse en la asignatura Física del Estado Sólido cuando se introduzca en ella el estudio de los nuevos sistemas hechos por el hombre como pozos cuánticos y superredes, que constituyen una de las direcciones de trabajo de la microelectrónica en el presente.

Es de notar que cuando la masa es constante, el resultado cuasiclásico coincide con el clásico obtenido en [4]. Sería interesante estudiar la Mecánica Clásica de los sistemas de masa variable para ver si tal coincidencia persiste.

Físicamente aquí hay una interpretación clara. La masa efectiva viene determinada, para una energía dada, como el promedio en la celda unitaria de una relación con el potencial que experimenta el electrón y resulta factible entonces, después de este *promedio*, sustituir el conjunto electrón-potencial periódico, por una *partícula libre* cuyo comportamiento reproduce el del sistema.

Como se ve, además, cuando hay un punto de salto en el interior de la celda unitaria la expresión obtenida es más compleja.

El análisis hecho es válido para $E>\max\{V_e(x)\}$. Si F es tal que hay dos puntos de retorno clásicos en cada celda unitaria, la relación de dispersión es un tanto más compleja que (7), i.e., $\cos qd = 2\,\mathrm{Re}\{pe^{ik(x+d,x)}\}$ [7], siendo aquí p un parámetro que depende de la forma específica del potencial y la masa y que sirve para escribir la matriz de transferencia. La masa efectiva que de ella se deduce se aparta del resultado clásico.

BIBLIOGRAFÍA

[1] Bassani, F.
Electronic States and Optical Transitions in Solids. (Pergamon Press) Oxford 1975.

[2] Kittel, Ch.
Introduction to Solid State Physics. 4ta. Ed. (Edición R) Cuba, 1971.

[3] Kirieiev, P.S.
Semiconductor Physics Chap. II Mir Publishers (1974).

[4] Nawrocki, M. y J.A. Gaj
Am. J. Phys. 52, 807 (1984).

[5] Morrow, R.A. y K.R. Brownstein
Phys. Rev. B 30, 678 (1984).

[6] Milanovic, V. y D. Tjapkin
Phys. Stat. Sol. (b) 110, 687 (1984).

[7] Pérez Álvarez, R. y H. Rodríguez Coppola
Enviado a Phys. Stat. Sol. (b) sobre la TM en problemas 1D-Schrödinger.

[8] Pérez Álvarez, R.; H. Rodríguez Coppola; J. López Gondar y M. Lago Izquierdo
Enviado a Phys. Stat. Sol (b) sobre TM en la aproximación cuasi-clásica.