

Bases de valència i conducció en el mètode kp

Un electró en un cristall està descrit per un hamiltonià $\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}$ el qual òbviament té la simetria del cristall i, en particular, la simetria del subgrup puntual de simetria del cristall. Les seues funcions $\Phi_{n,k}(\vec{r})$ seran bases de les irreps d'aquest grup. Sabem que:

$$\Phi_{n,k}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} u_{n,k}(\vec{r})$$

Aleshores, en el punt Γ ($\vec{k} = 0$) tenim que:

$$\Phi_{n,0}(\vec{r}) = u_{n,0}(\vec{r})$$

cosa que vol dir que les $u_{n,0}(\vec{r})$ seran base de les irreps del grup puntual del cristall ¹. En el cas d'un cristall Zinc-Blenda el grup puntual és T_d (en el cas del diamant és O_h). Les funcions $u_{n,0}(\vec{r})$ són bases d'irreps de T_d (d' O_h en el diamant). La simetria particular de cada banda (la del fons de conducció, la del sostre de valència, etc.) és pot determinar experimentalment (per exemple amb mesures espectroscòpiques sobre un cristall sotmés a pertorbacions, com ara camps elèctrics i magnètics, i observant com es trenquen les degeneracions). Després d'un treball exhaustiu s'ha determinat que per a la ZincBlenda la primera banda de conducció és de simetria Γ_1 i la darrera de valència Γ_5 . Atenent a que els orbitals atòmics s, p_x, p_y, p_z són bases d'aquestes mateixes irreps, se solen etiquetar aquestes funcions de Bloch en la forma $|s\rangle, |p_x\rangle, |p_y\rangle, |p_z\rangle$, i parlem de banda de conducció s i bandes de valència o bandes p . Podem aplegar a aquest mateix resultat pensant microscòpicament si utilitem en cada punt de la xarxa cristal·lina una base orbitalica s, p_x, p_y, p_z . Tranformen aquesta base i obtenim les funcions de Bloch:

$$u_{n,k}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_R e^{i\vec{k}\vec{R}} \chi_n(\vec{r} - \vec{R})$$

en particular $u_{n,0}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_R \chi_n(\vec{r} - \vec{R})$ veiem que té la mateixa simetria que $\chi_n(\vec{r})$.

Si el terme d'espín-orbita és important, aleshores no és possible la separació espai-espín i caldrà utilitzar la base amb espín: $\{|s, \uparrow\rangle, |s, \downarrow\rangle, \dots, |p_z, \downarrow\rangle\}$. Aquesta base no és pròpia del terme d'interacció espín-orbital. Podem fer combinacions que sí que en siguin pròpies si adaptem la base al moment angular total $|J^2, J_z\rangle$. En aquesta base l'hamiltonià (o més específicament, l'hamiltonià $k \cdot p$ en $\vec{k} = 0$) és diagonal.

¹Cal aclarir que fora del punt Γ les funcions $u_{n,k}(\vec{r})$ amb $\vec{k} \neq 0$, que són funcions pròpies de l'hamiltonià $k \cdot p$ (hamiltonià amb menys simetria que $\hat{\mathcal{H}}$), no ho són de l'hamiltonià $\hat{\mathcal{H}}$ del cristall i aleshores no són bases d'irreps del grup puntual del cristall. Per això fora del punt Γ es mesclen les funcions, $u_{n,k}(\vec{r}) = \sum_n c_{n,k} u_{n,0}(\vec{r})$, i es trenca la degeneració que presenten les bandes en Γ .