

# El model $k \cdot p$ : una visió general per a principiants

Josep Planelles

23 de juny de 2021

## Preàmbul

El primer contacte d'un neòfit amb l'argot de semiconductors pot ser xocant. Hom sent o llegeix que hi ha electrons i també forats (*holes*). Aquest, el concepte de forat, el pot assumir com la vacança d'un electró i continua llegint i/o escoltant. Però després apareix el concepte de massa efectiva. Resulta que, en un semiconductor, els electrons es comporten com si la seua massa fos diferent de la ben coneguda massa de l'electró. És a dir, que l'acció d'una força provoca una acceleració diferent si l'electró està en un semiconductor o està al buit. Amb un poc d'esforç, el neòfit s'imagina, en la lluna estant, que l'espantegut i aleshores experimenta un desplaçament diferent al que tindria en la terra. Per tant, imagina que el conjunt de *cores* i la resta d'estructura cristal·lina exerceix una camp de forces que aviva o amorteix la reacció a la força ... i continua llegint. Les dificultats creixen quan li diuen que la massa pot ser anisòtropa. És a dir, que segons la força s'exerceix de dalt a baix o d'esquerra a dreta l'inèrcia de l'electró pot ser diferent. I arriba a l'esperpent quan sent que els *holes* tenen massa negativa! És a dir que si exerceix una força cap a la dreta el moviment és ... cap a l'esquerra! Aplegats a aquest punt el neòfit comença a pensar en Lewis Carroll i Alícia al país de les meravelles. Açò no sembla ciència o més bé sembla ciència-ficció. Doncs no, és ciència. El problema és que quan se fa divulgació millor no dir res o explicar-se un poc més. Tractaré de contextualitzar aquestes definicions per fer-les assumibles sense necessitat de fer *actes de fe*, cosa que mai s'ha de fer en ciència.

## 1 Contextualitzant els conceptes

L'equació d'autovalors de l'hamiltonià d'un electró en un cristall la podem escriure:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r}) - E_n\right)\Psi_n(\mathbf{r}) = 0. \quad (1)$$

on el primer terme és l'energia cinètica i  $V(\mathbf{r})$  és un potencial periòdic.

Convé escriure la funció d'ona en la forma  $\Psi_{nk}(\mathbf{r}) = Ne^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}u_{nk}(\mathbf{r})$ , on  $u_{nk}(\mathbf{r})$  és una funció periòdica. La substitució de la funció en l'equació (1) dóna lloc a l'anomenada equació d'autovalors de l'hamiltonià  $k \cdot p$  (d'ara en avant simplement  $kp$ ):<sup>1</sup>

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r}) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{\hbar}{m}\mathbf{k} \cdot \mathbf{p} - E_{nk}\right)u_{nk}(\mathbf{r}) = 0 \quad (2)$$

on  $\mathbf{p}$  representa l'operador vectorial  $-i\hbar\nabla$ . (De manera més compacta podem representar l'equació (2) en la forma  $(\hat{\mathcal{H}}_{kp} - E_{nk})|u_{nk}\rangle = 0$ ).

---

<sup>1</sup>Més detalls sobre perquè convé aquesta escriptura de la funció i la poca àlgebra de la substitució de la funció en l'equació (1) els podeu trobar en la referència [1].

Si ara fem que  $\mathbf{k} = 0$  en l'equació (2), retrobem l'equació (1) per a  $u_{n0}(\mathbf{r})$ . Aleshores, en fer la resolució, obtenim la base d'autofuncions  $\{u_{n0}(\mathbf{r}), n = 1, 2, 3 \dots \infty\}$  del punt  $k = 0$ , que en l'argot de semiconductors s'anomena punt  $\Gamma$ . Si ens separem d'aquest punt ( $k \neq 0$ ) sempre podem escriure les funcions pròpies en el punt  $k$ ,  $u_{nk}(\mathbf{r})$ , en la base de funcions  $u_{n0}(\mathbf{r})$  del punt  $\Gamma$ .

Els elements de matriu  $\langle u_{n0} | \widehat{\mathcal{H}}_{kp} | u_{n'0} \rangle$  de l'hamiltonià  $kp$  en aquesta base són:

$$\langle u_{n0} | \widehat{\mathcal{H}}_{kp} | u_{n'0} \rangle = \left( E_{n'0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right) \delta_{n,n'} + \frac{\hbar \mathbf{k}}{m} \cdot \mathbb{P}_{n,n'} \quad (3)$$

on  $\mathbb{P}_{n,n'} = \langle u_{n0} | \mathbf{p} | u_{n'0} \rangle$  és l'anomenat paràmetre de Kane.

## 1.1 Model d'una banda

Si estem interessats en una descripció no excessivament precisa d'uns autovalor i autovector determinats, podem triar a  $\mathbf{k} \neq 0$  la funció de  $\mathbf{k} = 0$  i simplement calcular el valor expectació de l'hamiltonià  $kp$  en aquesta funció. A partir de l'equació (3), tenint en compte que  $\mathbb{P}_{n,n} = \langle u_{n0} | \mathbf{p} | u_{n0} \rangle = 0$  per ser  $\mathbf{p}$  senar, trobem que:

$$E_n(k) = E_{n0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (4)$$

Resulta doncs un model parabòlic (l'energia vs.  $k$  és una paràbola). La curvatura (o segon derivada) d' $E_n(k)$  és precisament la inversa la massa  $m$  de l'electró, que en unitats atòmiques és la unitat. Podem incloure l'acció de la resta de funcions, que en l'argot de semiconductors anomenen *bandes remotes*, amb pertorbacions a segon ordre (hem vist que  $\mathbb{P}_{n,n} = \langle u_{n0} | \mathbf{p} | u_{n0} \rangle = 0$ , per tant la contribució pertorbacional a primer ordre és zero):

$$E_{nk}^{(2)} = - \sum_{n'}' \frac{|\langle u_{n0} | \frac{\hbar}{m} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} | u_{n'0} \rangle|^2}{E_{n'0} - E_{n0}} = \sum_{n'}' \frac{\hbar^2 |\mathbf{k} \cdot \mathbb{P}_{n,n'}|^2}{m^2 (E_{n0} - E_{n'0})} = \sum_{\alpha=x,y,z} \sum_{n'}' \frac{\hbar^2 k_\alpha^2 \cdot |\mathbb{P}_{n,n'}^\alpha|^2}{m^2 (E_{n0} - E_{n'0})} \quad (5)$$

Amb l'inclusió de bandes remotes l'energia resulta per tant:

$$E_{nk} = E_{n0} + \sum_{\alpha=x,y,z} \hbar^2 k_\alpha^2 \left\{ \frac{1}{2m} + \frac{1}{m^2} \sum_{n'}' \frac{|\mathbb{P}_{n,n'}^\alpha|^2}{E_{n0} - E_{n'0}} \right\} \quad (6)$$

$$= E_{n0} + \sum_{\alpha=x,y,z} \frac{\hbar^2 k_\alpha^2}{2} \frac{1}{m_\alpha^*} \quad (7)$$

on  $m_\alpha^*$  és l'anomenada massa efectiva de l'electró. És a dir, l'electró no està en un semiconductor com està al buit, on únicament presenta energia cinètica i, per tant, té una energia parabòlica respecte del moment lineal. En un semiconductor hi ha el potencial periòdic. Ara bé, de manera aproximada, l'electró allí se comporta *com si* estigués al buit però la seua massa (i.e., l'inversa de la curvatura de la funció energia) fos una altra que anomenem massa efectiva  $m_\alpha^*$  de l'electró.

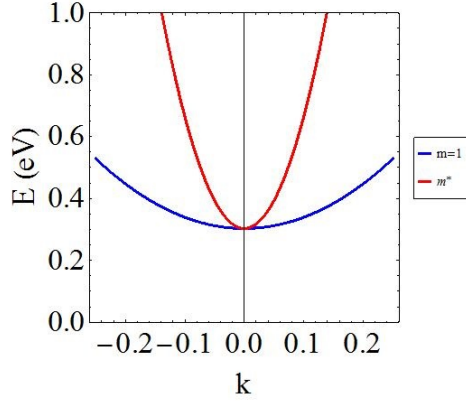
Més encara, si mirem l'equació (6) observem que les curvatures (les segones derivades) en les diferents direccions poden ser diferents. Açò implica que si bé la massa de l'electró lliure és isòtropa, la massa efectiva és, en principi, anisòtropa. Tanmateix, si llegim literatura trobem la afirmació repetida que la massa de l'electró és altament isòtropa. Tractem d'entendre perquè.

En un semiconductor típic, com ara el *AsGa*, les bandes se formen com una combinació lineal dels orbitals dels àtoms. L'anomenada banda de conducció (primera banda vacant) és generalment una combinació lineal periòdica en la que intervenen els orbitals *s* vacants dels metalls, mentre que les bandes de valència (bandes plenes) fan intervindre els orbitals *p*. Altres bandes remotes impliquen orbitals *d*, etc. Per tant,

els orbitals més propers als  $s$  són els  $p$  i la seua és la pertorbació més important, mentre que la resta de bandes tenen un efecte menor.

Pel que hem dit, la conducció té simetria  $|S\rangle$  i els paràmetres  $P$  de Kane amb la banda de simetria  $|P\rangle$  no nuls són  $P = \langle S|\hat{P}_x|P_x\rangle = \langle S|\hat{P}_y|P_y\rangle = \langle S|\hat{P}_z|P_z\rangle$ , per tant, la contribució pertorbacional a la massa és idèntica en les tres direccions (isòtropa).<sup>2</sup>

Ficant números, per exemple amb una  $E_{n0}$ , que per a la banda de conducció anomenem  $E_c$ , de  $0.303\text{ eV}$  i una massa efectiva  $m^* = 0.1 m_0 = 0.1$  a.u., la pinta de la banda de conducció al voltant de  $k = 0$  (punt  $\Gamma$ ) és, en comparació amb la banda d'un electró lliure  $m = 1$  a.u. com mostra la figura següent:

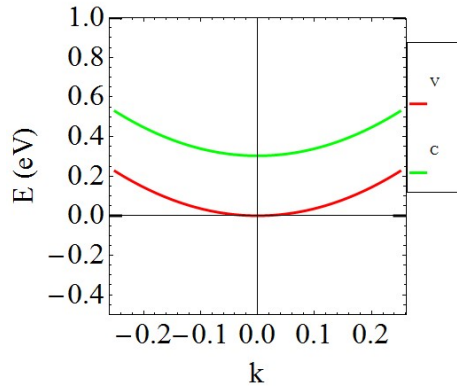


## 1.2 Model de dues bandes

Podem considerar una banda de conducció  $|S\rangle$  i una de valència  $|Z\rangle$ . Sense incloure bandes remotes, amb  $P = \langle S|\hat{P}_z|Z\rangle$ , l'expansió en a.u. de l'hamiltonià en la base  $\{|S\rangle, |Z\rangle\}$  queda:

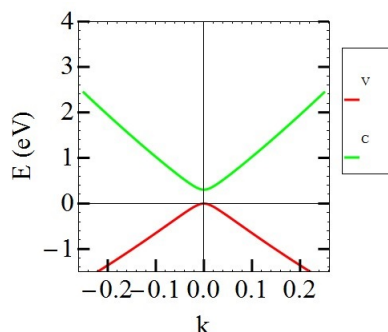
$$\begin{pmatrix} E_c + \frac{k^2}{2m_e} & kP \\ kP & E_v + \frac{k^2}{2m_h} \end{pmatrix} \quad (8)$$

Per a uns valors  $E_c = 0.303\text{ eV}$ ,  $E_v = 0$  (situem l'extrem de la banda de valència a energia zero),  $P = 0$ ,  $m_e = m_h = 1$ , la forma de les bandes resulta:



<sup>2</sup>En estructures Zinc-Blenda (Simetria  $T_d$ ), en la que cristal·litzen molts dels semiconductors, totes les contribucions  $\langle S|\hat{P}_\alpha|D_{\beta\gamma}\rangle$  són zero, excepte  $\langle S|\hat{P}_x|D_{yz}\rangle$  i permutacions cícliques (en  $T_d$   $xyz$  té simetria  $A_1$ ). En general, com hem dit més amunt, la contribució realment important és la de la valència  $|P\rangle$ , motiu pel qual la massa efectiva de la conducció és altament isòtropa.

Veiem que tant la conducció com la valència són bandes parabòliques amb masses (curvatura) positives. L'interacció conducció-valència amb un paràmetre de Kane  $P = \sqrt{E_p/2}$  per la  $E_p$  del  $HgTe$  que val  $18.9 eV$ , dóna lloc a:<sup>3</sup>



$$\begin{aligned}
 \mathbf{k}=0 & \quad \begin{pmatrix} 0. & \{0, -1.\} \\ 0.303 & \{-1., 0\} \end{pmatrix} \\
 \mathbf{k}=0.2 & \quad \begin{pmatrix} -1.35759 & \{0.67393, -0.738795\} \\ 1.94892 & \{-0.738795, -0.67393\} \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

La interacció conducció-valència ha fet que unes masses positives i unes bandes parabòliques en absència d'interacció canvien el signe de la massa de la valència (anomenada banda de *holes* o forats), a la vegada que les bandes passen a ser no parabòliques (en aquest cas, fortament lineals). En a part inferior de la figura es pot veure l'evolució dels autovalors i els autovectors associats representats en la base  $\{|S\rangle, |Z\rangle\}$ . Per a un valor  $k = 0$ , els termes extradiagonals són nuls i es veu clarament que la conducció que està lligada a l'autovalor més energètic (que coincideix amb el valor  $E_c = 0.303 eV$ ) és la primera component, mentre que el *hole*, amb energia zero (que coincideix amb  $E_v = 0$ ) és la segon component. Per a un valor  $k = 0.2$  observem una gran mescla, tot i que conserven major pes les component que a  $k = 0$  eren les que tenien tot el pes.

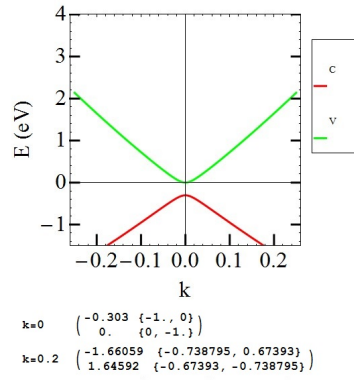
### 1.3 Model de dues bandes amb inversió

Hem dit adès que, en general, la banda de conducció és de simetria  $|S\rangle$ , on se fan intervenir els orbitals  $s$  vacants del metall, mentre que la valència és de simetria  $|P\rangle$  i resulta bàsicament de la combinació d'orbitals  $p$  ocupats. Però hi ha casos en que no és així. Per exemple, en el cas del  $PbTe$ , el  $Pb$  pateix l'anomenada contracció dels Lantànids mentre que el  $Te$  no. La contracció de volum i l'enorme càrrega nuclear del  $Pb$  fa que s'altere la posició relativa dels orbitals  $s$  i  $p$ , passant l'orbital  $s$  a ser més estable que el  $p$ . Aleshores la vacança (conducció) és de simetria  $|P\rangle$  i l'ocupació (valència) de simetria  $|S\rangle$ . Això va portar a introduir el concepte de *bandgap* negatiu.[2] (Per a més detalls podeu fer una ullada a les referències [3] i [4]).

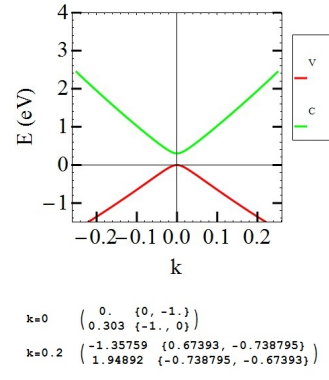
Una simulació del model de dos bandes amb inversió, consistent a repetir el càlcul anterior canviant els signe d' $E_c$  ( $E_c = -0.303 eV$ ), dóna com a resultat el que mostrem en la figura següent, junt amb el resultat anterior per a una millor comparació:<sup>4</sup>

<sup>3</sup>Sobre la relació  $P = \sqrt{E_p/2}$  veure nota al final de la secció.

<sup>4</sup>Adonem-nos que en aquest cas (dues bandes amb inversió) la banda  $|S\rangle$  (de menor energia) està ocupada, mentre que la banda  $|P\rangle$  (de major energia) queda vacant.



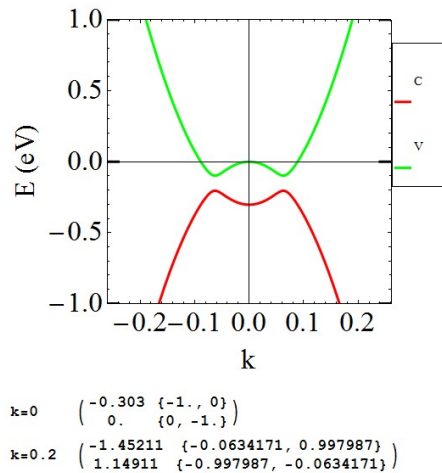
2 Bandes amb inversió



2 Bandes

Fem notar que, a banda de la inversió de simetria, en tots dos casos l'extrem de la banda  $|P\rangle$  en  $\Gamma = 0$  té una energia  $E = 0$ , però mentre que en el cas estàndard la curvatura de la banda  $|P\rangle$  és negativa, en el cas del *PbTe* és positiva, amb el mateix canvi en la banda de simetria  $|S\rangle$ .

L'acció de bandes remotes poden, en aquest cas de bandes amb inversió, generar perfils de bandes singulars. El mateix càlcul anterior però amb unes masses efectives  $m_e = m_h = m_0/10$ , amb un paràmetre de Kane també deu vegades menor  $P/10$  dóna lloc al següent perfil:



Si mirem la composició dels autovectors observem un canvi significatiu del pes de les components en  $k = 0$  (punt  $\Gamma$ ) i  $k = 0.2$ .

### 1.3.1 Relació $P = \sqrt{E_p/2}$

Considerem el model conducció-valència de dues bandes

$$\begin{pmatrix} E_c^0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} & kP \\ kP & E_v^0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \end{pmatrix} \quad (9)$$

i en lloc de diagonalitzar-lo, aproximem els autovalors amb pertorbacions de 2on ordre:

$$E_c = E_c^0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} - \frac{P^2 k^2}{E_c^0 - E_v^0} \quad (10)$$

$$E_v = E_v^0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} - \frac{P^2 k^2}{E_v^0 - E_c^0}. \quad (11)$$

Si definim  $E_p \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} = P^2 k^2$ , ho podem reescriure en la forma:

$$E_c = E_c^0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} - \frac{E_p}{E_c^0 - E_v^0} \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} = E_c^0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \underbrace{\left(1 - \frac{E_p}{E_c^0 - E_v^0}\right)}_{\gamma_c} \quad (12)$$

$$E_v = E_v^0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} - \frac{E_p}{E_v^0 - E_c^0} \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} = E_v^0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \underbrace{\left(1 - \frac{E_p}{E_v^0 - E_c^0}\right)}_{-\gamma_v} \quad (13)$$

En unitats atòmiques,  $\hbar = m_0 = 1$ ,  $E_p \frac{k^2}{2} = P^2 k^2 \rightarrow P = \sqrt{E_p/2}$ .

## 1.4 Sobre la anisotropia de les bandes de valència

Haviem comentat adès que la massa efectiva de la conducció, de simetria  $|S\rangle$ , és altament isòtropa. En el cas de la valència, que té simetria  $|P\rangle$ , és fàcil entendre que una descripció realista haurà d'implicar el concurs dels tres orbitals  $p$  degenerats. Per tant, una base mínimament correcta per a la valència seria  $\{|X\rangle, |Y\rangle, |Z\rangle\}$ . Si considerem l'espín i tenim en compte l'important acoblament espín-òrbita, la base de la valència passa a ser de sis elements, que sempre podrem triar adaptats al moment angular total i la seua component  $z$ , atès que el moment angular total i la seua component  $z$  commuten amb l'operador d'espín-òrbita. Els números quàntics seran  $J = 3/2$  (degeneració 4), separats de  $J = 1/2$  (degeneració 2) pel terme espín-òrbita. Per tant, una descripció mínimament raonable del top de la valència ha d'implicar els quatre estats degenerats  $J = 3/2$  ( $J_z = \pm 3/2$  anomenats *heavy hole* HH,  $J_z = \pm 1/2$ , anomenats *light hole* LH). La corresponent base és:

$$\begin{aligned} |3/2, 3/2\rangle &= -\frac{1}{\sqrt{2}}|(X + iY)\uparrow\rangle & |3/2, -3/2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}|(X - iY)\downarrow\rangle \\ |3/2, 1/2\rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}}|Z\uparrow\rangle - \frac{1}{\sqrt{6}}|(X + iY)\downarrow\rangle & |3/2, -1/2\rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}}|Z\downarrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}}|(X - iY)\uparrow\rangle \end{aligned} \quad (14)$$

Considerem per exemple la interacció del HH ( $3/2, 3/2$ ) amb un estat de simetria  $|S\rangle$ . La contribució a la massa efectiva de  $k_\alpha$  implica el terme  $\langle S|\hat{P}_\alpha| - \frac{1}{\sqrt{2}}(X + iY)\rangle$ , per tant, la contribució  $\alpha = z$  és zero, mentre que no ho són les dues contribucions (iguals)  $\alpha = x, y$ . El mateix raonament el podem fer si no considerem l'espín: en aquest cas considerem, per exemple, l'estat  $|Z\rangle$ . La contribució a la massa efectiva de  $k_\alpha$  a aquest estat implica el terme  $\langle S|\hat{P}_\alpha|Z\rangle$ . Per tant és zero si  $\alpha = x, y$ , mentre que no ho és si  $\alpha = z$ . Per tant, les masses efectives en la direcció  $z$  seran diferents de les masses *in-plane*  $m_{xy}$ . Podem entendre doncs, de manera senzilla, perquè les masses efectives de *holes* són altament anisotròpiques  $m_z \neq m_{xy}$ .

## 2 Comentari final

Òbviament hi ha moltíssim més en  $kp$  que aquest petit *overview* que hem fet ací. L'objectiu ha estat mostrar que, efectivament, entrar a estudiar semiconductors és, en certa manera, com Àlicia travessant la porteta i entrant al país de les meravelles, on la vacança que deixa un electró passa a tenir vida pròpia en forma de *hole* i aquest *hole* és ben estrany: quant l'espentegeges, en lloc de separar-se de tu, torna contra tu. I cal parar molta atenció si li apliques una força: segons que la direcció siga de dalt-baix o esquerra-dreta la resposta pot ser ben diferent....

## Referències

- [1] [www3.uji.es/~planelle/APUNTS/SOLID/kp/kp\\_pert.pdf](http://www3.uji.es/~planelle/APUNTS/SOLID/kp/kp_pert.pdf)
- [2] C.R. Pidgeon and R.N. Brown, Phys. Rev. 146 (1966) 575.
- [3] [www3.uji.es/~planelle/APUNTS/SOLID/kp/Sals\\_de\\_Pb\\_amb\\_inversio.pdf](http://www3.uji.es/~planelle/APUNTS/SOLID/kp/Sals_de_Pb_amb_inversio.pdf)
- [4] [www3.uji.es/~planelle/APUNTS/SOLID/kp/Sals\\_Hg.pdf](http://www3.uji.es/~planelle/APUNTS/SOLID/kp/Sals_Hg.pdf)

## Apèndix

Incloem ací el codi Mathematica(R) amb el que he generat totes les figures i autovectors:

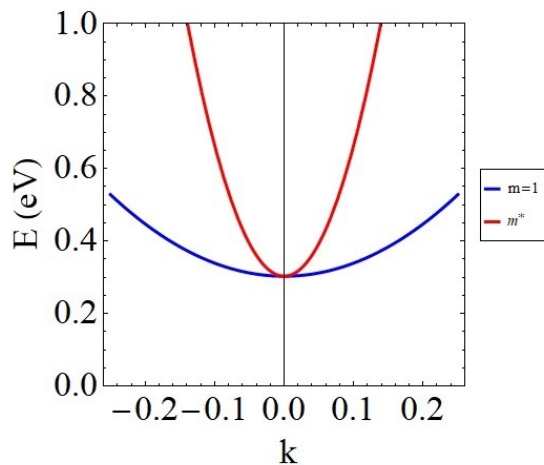
```
Quiet[Needs["PlotLegends`"]];
ClearAll["Global`*"];
T = Ec +  $\frac{1}{2 m_e} k^2$ ; Tv = Ev +  $\frac{1}{2 m_e} k^2$ ;
ham = {{T, P k}, {P k, Tv}}; ham // MatrixForm

$$\begin{pmatrix} Ec + \frac{k^2}{2 m_e} & k P \\ k P & Ev + \frac{k^2}{2 m_e} \end{pmatrix}$$



---


eV = 27.211324570273; xB = 0.529167; a = 0.646 * 10 / xB; Ec = 0.303 / eV; m = 0.1;
Plot[{eV * (Ec +  $\frac{1}{2} \left(k \frac{2 \pi}{a}\right)^2$ ), eV * (Ev +  $\frac{1}{2 m} \left(k \frac{2 \pi}{a}\right)^2$ )}, {k, -0.25, 0.25}, PlotRange -> {0, 1}, Frame -> True, FrameLabel -> {"k", "E (eV)"},
PlotStyle -> {{Thick, RGBColor[0, 0, 1]}, {Thick, RGBColor[1, 0, 0]}}, PlotLegend -> {"m=1", "m*"}, LegendShadow -> None, LegendPosition -> {1, 0},
LegendSize -> {0.3, 0.3}, AspectRatio -> 1, FrameTicksStyle -> Directive[FontSize -> 22], FrameTicksStyle -> Directive[FontSize -> 22],
LabelStyle -> Directive[FontSize -> 22]}
```



## 2 Bandes

```

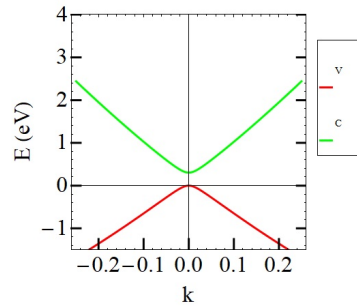
ClearAll["Global`*"];
T = Ec +  $\frac{1}{2 m_e} k^2$ ; Tv = Ev +  $\frac{1}{2 m_e} k^2$ ; Ev = 0; Ec = Eg;
ham = {{T, Pk}, {Pk, Tv}} /. k ->  $\left(k \frac{2 \pi}{a}\right)$ ;
eV = 27.211324570273; xB = 0.529167; a = 0.646*10/xB;
Eg = 0.303/eV; Ep = 18.8/eV; me = 1; P =  $\sqrt{E_p/2}$ ;
l1listal = {}; l1lista2 = {};
For[i = -0.25, i <= 0.25, i += 0.005,
aux = eV*Sort[Eigenvalues[ham /. k -> i]];
l1listal = AppendTo[l1listal, {i, aux[[1]] // Chop}];
l1lista2 = AppendTo[l1lista2, {i, aux[[2]] // Chop}];
]; Print[ListPlot[{l1listal, l1lista2}, PlotRange -> {-1.5, 4}, Frame -> True, Joined -> True,
FrameLabel -> {"k", "E (eV)"},
LabelStyle -> Directive[FontSize -> 22],
PlotStyle -> {{Thick, RGBColor[1, 0, 0]}, {Thick, RGBColor[0, 1, 0]}, {Thick, RGBColor[0, 0, 1]}, {Thick, RGBColor[0, 0, 0]}}, PlotLegend -> {"V", "C"},
LegendShadow -> None, LegendPosition -> {1, -0.00}, LegendSize -> {0.3, 0.75}, AspectRatio -> 1, FrameTicksStyle -> Directive[FontSize -> 22],
FrameTicksStyle -> Directive[FontSize -> 22],
Epilog -> {Thick, Line[{{#, -1.5}, {#, -1.25}}] & /@ Range[-0.3, 0.3, 0.1]}, Line[{{-0.30, #}, {-0.24, #}}] & /@ Range[-1, 5, 1]},
Line[{{0.3, #}, {0.24, #}}] & /@ Range[-1, 5, 1]}];

{evals, evecs} = Eigensystem[ham /. k -> 0.0] // Chop;
Print[" k=0 ", SortBy[Transpose[{evals*eV, evecs}], First] // MatrixForm];

{evals, evecs} = Eigensystem[ham /. k -> 0.2] // Chop;
Print[" k=0.2 ", SortBy[Transpose[{evals*eV, evecs}], First] // MatrixForm];

```

```
Print[" k=0.2 ", SortBy[Transpose[{evals*eV, evecs}], First] // MatrixForm]
```



```

k=0  $\begin{pmatrix} 0. & \{0, -1.\} \\ 0.303 & \{-1., 0\} \end{pmatrix}$ 
k=0.2  $\begin{pmatrix} -1.35759 & \{0.67393, -0.738795\} \\ 1.94892 & \{-0.738795, -0.67393\} \end{pmatrix}$ 

```

## 2 Bandes amb inversió

```

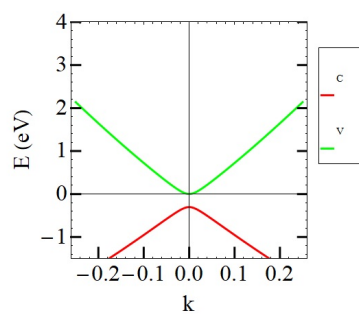
ClearAll["Global`*"];
T = Ec +  $\frac{1}{2 m_e} k^2$ ; Tv = Ev +  $\frac{1}{2 m_e} k^2$ ; Ev = 0; Ec = Eg;
ham = {{T, Pk}, {Pk, Tv}} /. k ->  $\left(k \frac{2 \pi}{a}\right)$ ;
eV = 27.211324570273; xB = 0.529167; a = 0.646*10/xB;
Eg = -0.303/eV; Ep = 18.8/eV; me = 1; P =  $\sqrt{E_p/2}$ ;
l1listal = {}; l1lista2 = {};
For[i = -0.25, i <= 0.25, i += 0.005,
aux = eV*Sort[Eigenvalues[ham /. k -> i]];
l1listal = AppendTo[l1listal, {i, aux[[1]] // Chop}];
l1lista2 = AppendTo[l1lista2, {i, aux[[2]] // Chop}];
];
Print[ListPlot[{l1listal, l1lista2}, PlotRange -> {-1.5, 4}, Frame -> True, Joined -> True, FrameLabel -> {"k", "E (eV)"},
LabelStyle -> Directive[FontSize -> 22], PlotStyle -> {{Thick, RGBColor[1, 0, 0]}, {Thick, RGBColor[0, 1, 0]}, {Thick, RGBColor[0, 0, 1]}, {Thick, RGBColor[0, 0, 0]}}, PlotLegend -> {"C", "V"},
LegendShadow -> None, LegendPosition -> {1, -0.00}, LegendSize -> {0.3, 0.75}, AspectRatio -> 1,
FrameTicksStyle -> Directive[FontSize -> 22], FrameTicksStyle -> Directive[FontSize -> 22],
Epilog -> {Thick, Line[{{#, -1.5}, {#, -1.25}}] & /@ Range[-0.3, 0.3, 0.1]}, Line[{{-0.30, #}, {-0.24, #}}] & /@ Range[-1, 5, 1]},
Line[{{0.3, #}, {0.24, #}}] & /@ Range[-1, 5, 1]}];

{evals, evecs} = Eigensystem[ham /. k -> 0.0] // Chop;
Print[" k=0 ", SortBy[Transpose[{evals*eV, evecs}], First] // MatrixForm];

{evals, evecs} = Eigensystem[ham /. k -> 0.2] // Chop;
Print[" k=0.2 ", SortBy[Transpose[{evals*eV, evecs}], First] // MatrixForm];

```





```

k=0  ( -0.303  {-1., 0}
      0.    {0, -1.} )
k=0.2 ( -1.66059  {-0.738795, 0.67393}
       1.64592  {-0.67393, -0.738795} )

```

## 2 Bandes amb inversió amb acció de remotes

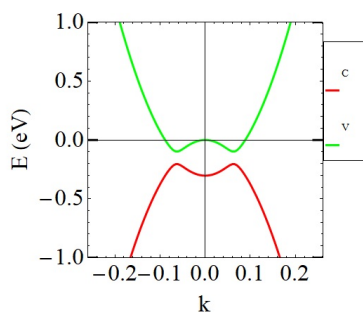
```

ClearAll["Global`*"];
T = Ec +  $\frac{1}{2 m_e} k^2$ ; Tv = Ev -  $\frac{1}{2 m_e} k^2$ ; Ev = 0; Ec = Eg;
ham = {{T, Pk}, {Pk, Tv}} /. k -> (k  $\frac{2 \pi}{a}$ );
eV = 27.211324570273; mB = 0.529167; a = 0.646 * 10 / mB;
Eg = -0.303 / eV; Ep = 18.8 / eV; me = 1; P =  $\sqrt{E_p / 2}$ ; me = me / 10; P = P / 10;
llista1 = {}; llista2 = {};
For[i = -0.25, i <= 0.25, i += 0.005,
  aux = eV * Sort[Eigenvalues[ham /. k -> i]];
  llista1 = AppendTo[llista1, {i, aux[[1]] // Chop}];
  llista2 = AppendTo[llista2, {i, aux[[2]] // Chop}];
];
Print[ListPlot[{llista1, llista2}, PlotRange -> {-1, 1}, Frame -> True, Joined -> True, FrameLabel -> {"k", "E (eV)"},
  LabelStyle -> Directive[FontSize -> 22], PlotStyle -> {{Thick, RGBColor[1, 0, 0]}, {Thick, RGBColor[0, 1, 0]}}, {Thick, RGBColor[0, 0, 1]}, {Thick, RGBColor[0, 0, 0]}},
  PlotLegend -> {"c", "v"}, LegendShadow -> None, LegendPosition -> {1, -0.00}, LegendSize -> {0.3, 0.75}, AspectRatio -> 1,
  FrameTicksStyle -> Directive[FontSize -> 22], FrameTicksStyle -> Directive[FontSize -> 22],
  Epilog -> {Thick, Line[{{#, -1.5}, {#, -1.25}} & /@ Range[-0.3, 0.3, 0.1]], Line[{{-0.30, #}, {-0.24, #}} & /@ Range[-1, 5, 1]],
  Line[{{0.3, #}, {0.24, #}} & /@ Range[-1, 5, 1]]]];

{evals, evecs} = Eigensystem[ham /. k -> 0.0] // Chop;
Print[" k=0 ", SortBy[Transpose[{evals + eV, evecs}], First] // MatrixForm];

{evals, evecs} = Eigensystem[ham /. k -> 0.2] // Chop;
Print[" k=0.2 ", SortBy[Transpose[{evals + eV, evecs}], First] // MatrixForm];

```



```

k=0  ( -0.303  {-1., 0}
      0.    {0, -1.} )
k=0.2 ( -1.45211  {-0.0634171, 0.997987}
       1.14911  {-0.997987, -0.0634171} )

```