21 / 10 / 2022

FÍSICA DE SEMICONDUTORES E NANOESTRUTURAS

FICHA TP3 - BANDAS DE ENERGIA, Z BRILLOUN E MASSA EFETIVA - 1

① Prove que as 2 formulações seguintes são equivalentes (T. Bloch).

vetor da rede direta

i) $\psi_k(x) = e^{ikx} u_k(x)$; $u_k(x) = u_k(x+a)$

ii) $\psi_k(x+a) = \psi_k(x) e^{ika}$

≠ formulações do teorema de Bloch

vai simplificar

$\psi_k(x+a) = e^{ik(x+a)} u_k(x+a) \Leftrightarrow$

$\Leftrightarrow \psi_k(x+a) = e^{ikx} u_k(x+a) e^{ika} \Leftrightarrow$, pois $u_k(x) = u_k(x+a)$

$\Leftrightarrow \psi_k(x+a) = e^{ikx} u_k(x) e^{ika} \Leftrightarrow$

$\Leftrightarrow \psi_k(x+a) = \psi_k(x) e^{ika}$, pois $\psi_k(x) = e^{ikx} u_k(x)$

② Discute brevemente o teorema de Bloch e as principais consequências.

Devido ao potencial periódico da rede cristalina

(...) → pedir a alguém

__/__/__

③ Explique qual a origem dos gaps de energia. E(k).

intervalo de energia onde ñ há "posições" para o e⁻ ← significa que para estes valores de k's a f. de o. ñ tem solução

são consequências das reflexões de Bragg que ocorrem nos planos de Bragg (que são resultado da simetria da rede recíproca)

O gap ocorre entre $-\pi/a$ e π/a (nas fronteiras da zona de Brillouin.

④ Explique de forma sucinta a aproximação do e⁻ quase livre.

↳ considera o e⁻ livre unicamente perturbado por um potencial (ñ se considera as interações entre os e⁻).

é sentido + nas fronteiras das zonas de Brillouin (pontos de degenerescência) ou zonas

isto vai implicar a criação da massa efetiva.

o efeito do potencial traduz na massa da partícula sob a força de um campo externo

Ou seja, usa-se a massa efetiva porque tem-se em consideração o efeito do potencial

⑤ Prove a 1 dimensão que a f. de o. de Bloch para um vetor de onda k fora da 1ª ZB ($\pi/a < k < 3\pi/a$) se pode reduzir à 1ª ZB.

① Começar pela formulação do teorema de Bloch:

$$\psi_k(\vec{r}+\vec{a}) = \psi_k(\vec{r})\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}}$$

vem de $e^{i2\pi} = \cos(2\pi) + i\sin(2\pi) = 1$

Temos que $k = \frac{2\pi}{a} + k'$ onde $|\vec{k}'| < \pi/a$ → 1ª zona de Brillouin

Logo, vamos ter que:

a 1 D

$$\psi_k(x+a) = \psi_k(x)\, e^{i\left(\frac{2\pi}{a}+k'\right)a} = \psi_k(x)\, e^{i\frac{2\pi}{a}a}\, e^{ik'a} =$$

$$= \psi_k(x)\, e^{ik'a}$$

como $|k'| < \pi/a$, reduzimos então a f. de o. de Bloch à 1ª ZB.

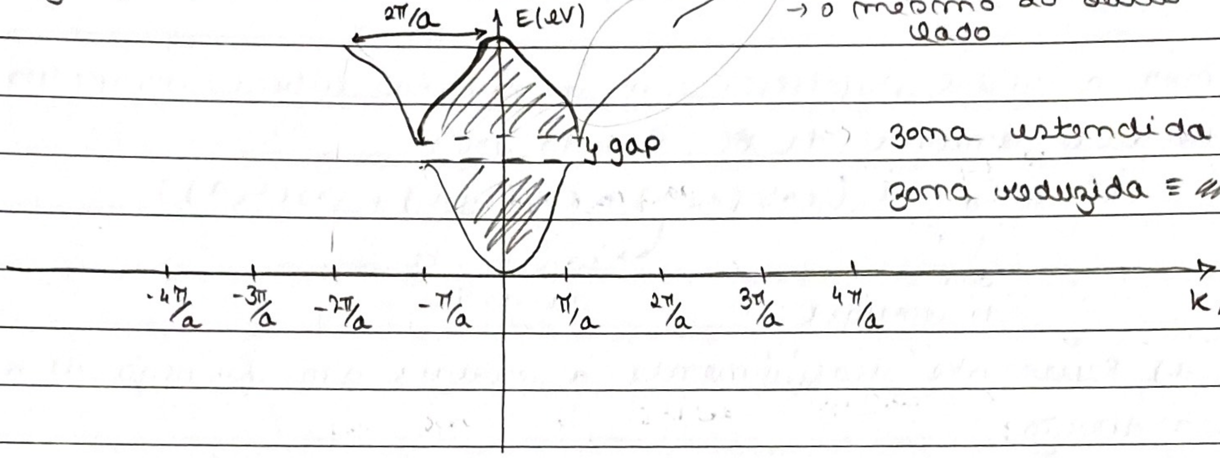
__/__/__

→ só representa os k a aumentar e a E tem a aumentar

⑥ Na aproximação do e⁻ quase livre desenhe a curva de dispersão na zona estendida e na zona reduzida e indique como é que a partir de um se obtém a outra

↓ translação do vetor da rede recíproca $2\pi/a$.

Começando por representar num gráfico, a curva de dispersão:



⑦ Qual a importância da 1ª ZB?

Espaço real ⟷ espaço recíproco (de Fourier ou dos $\vec{k}$)

comprimento — $(\text{comprimento})^{-1}$

ⓐ → constante de rede — vetor rede recíproco $2\pi/a$

Célula Wigner-Seitz — 1ª ZB

estrutura a 3D — interação de f. de onda com potencial cristalino

↓

(...) → pedir a alguém — a curva de dispersão da 1ª ZB permite conhecer a 3D o comportamento do semicondutor

⑧ Prove que o teorema de Bloch permanece inalterado quando $k \rightarrow k + G$.

⑫ Escrever a 1ª formulação do teorema de Bloch

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{a}) = \psi_{\vec{k}}(\vec{r})\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}}$$

NOTA: $e^{i\vec{G}\cdot\vec{a}} = 1$

Considerando que $k' = k + G$. Então vamos ter que:

$$\psi_{\vec{k}+\vec{G}}(\vec{r} + \vec{a}) = \psi_{\vec{k}+\vec{G}}(\vec{r})\, e^{i(\vec{k}+\vec{G})a} =$$

$$= \psi_{\vec{k}+\vec{G}}(\vec{r})\, e^{i\vec{k}a}\, e^{i\vec{G}a} =$$

$$= \psi_{\vec{R}+\vec{G}}(\vec{r})\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}}$$

(...) → pedir a alguém

__/__/__

(9) Porque é que o e^-

fazer em casa

(10) Para o cristal hipotético com estrutura cúbica simples o espetro de energia da BC é dado por:

$$E(\vec{k}) = \underbrace{E_0}_{\text{constante de energia}} - t\,(\cos(k_x \underbrace{a}_{\text{constante da rede}}) + \cos(k_y a) + \cos(k_z a))$$

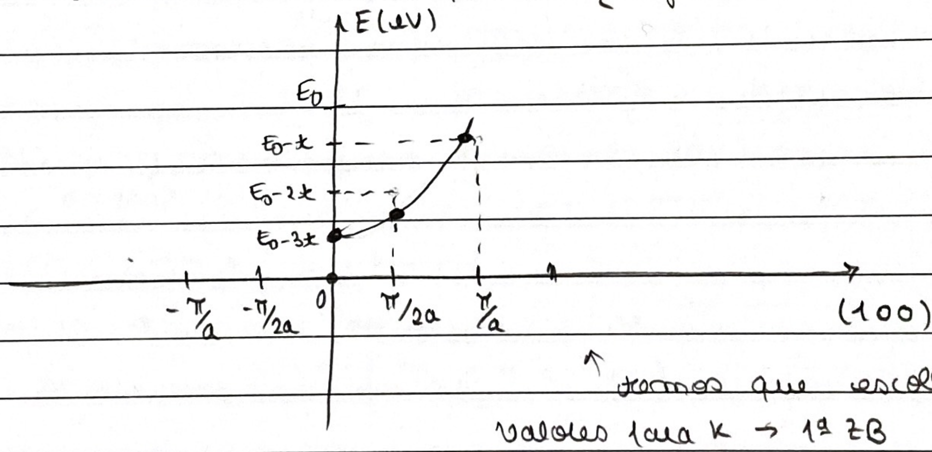
a) Represente graficamente a energia em função de k para a direção:

i) (100)

ii) (111)

(i)

$\vec{k} // (100)$ Queremos uma representação gráfica:



temos que escolher valores para k → 1ª ZB

Sabemos que: $\vec{k} = k_x \underset{= \hat{x}}{\hat{i}} + k_y \underset{= \hat{y}}{\hat{j}} + k_z \underset{= \hat{z}}{\hat{k}}$, onde $|\vec{k}| = k$

Não esquecer: $\cos(0) = 1$

Como temos $\vec{k} // (100)$, então $k_x = k$ e $k_y = k_z = 0$

$\Downarrow$

daqui tiramos que $E(\vec{k}) = E_0 - t(\cos(k_x a) + 2)$

Para $k = 0 \Rightarrow E(0) = E_0 - 3t$; Para $k = \frac{\pi}{2a} \Rightarrow E\left(\frac{\pi}{2a}\right) = E_0 - 2t$

Para $k = \frac{\pi}{a} \Rightarrow E\left(\frac{\pi}{a}\right) = E_0 - t$

(iii)

$\vec{K} \,//\, (111)$

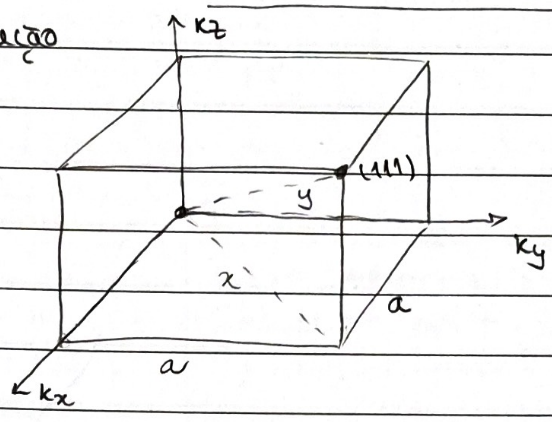
Para descobrir o vetor de direção (111):

$x^2 = a^2 + a^2 \Leftrightarrow$

$\Leftrightarrow x^2 = 2a^2 \Leftrightarrow$

$\Leftrightarrow x = a\sqrt{2}$

Cubo com arestas a



$\boxed{|\vec{K}| = K}$ para $\vec{K} \,//\, (100)$

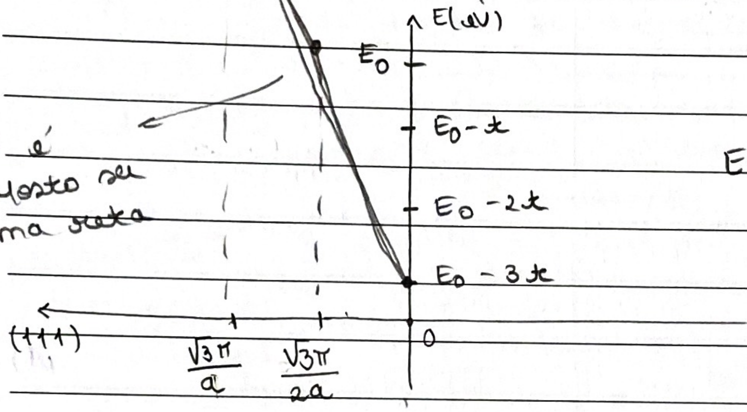
$x^2 + a^2 = y^2 \Leftrightarrow$

$\Leftrightarrow a^2 \cdot 2 + a^2 = y^2 \Leftrightarrow$

$\Leftrightarrow y^2 = 3a^2 \Leftrightarrow y = a\sqrt{3}$ ⟶ daqui retiramos que $|\vec{K}| = \frac{K}{\sqrt{3}}$

daqui: $\vec{K} = \frac{K}{\sqrt{3}} (\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})$

Graficamente, temos que:



Temos que:

$$E(\vec{K}) = E_0 - t\left(\cos\left(\frac{K}{\sqrt{3}}a\right) + \cos\left(\frac{K}{\sqrt{3}}a\right) + \cos\left(\frac{K}{\sqrt{3}}a\right)\right)$$

$\Downarrow$

- Para $k = 0 \Rightarrow E(0) = E_0 - 3t$
- Para $k = \frac{\sqrt{3}\pi}{2a} \Rightarrow E\left(\frac{\sqrt{3}\pi}{2a}\right) = E_0$
- Para $k = \frac{\sqrt{3}\pi}{a} \Rightarrow E\left(\frac{\sqrt{3}\pi}{a}\right) = E_0 + 3t$

iv) Calcule a massa efetiva para $k = 0$.

é dada por: $\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \underbrace{\left.\frac{\partial^2 E(k)}{\partial k}\right|_{k=0}}_{\text{começando por aqui:}}$

NOTA: ter em atenção que m^* não é um escalar e sim um tensor

① calculando a 1ª derivada:

$$\frac{\partial E(k)}{\partial k} = \frac{\partial}{\partial k}\left(E_0 - t\left(\cos(k_x a) + \cos(k_y a) + \cos(k_z a)\right)\right) =$$

$$= ta\left(\sin(k_x a) + \sin(k_y a) + \sin(k_z a)\right)$$

② calculando a 2ª derivada:

$$\frac{\partial^2 E(k)}{\partial k^2} = \frac{\partial}{\partial k}\left(ta\left(\sin(k_x a) + \sin(k_y a) + \right.\right.$$

acabar de passar