Física de Semicondutores e Nanoestruturas (MF+MIEF)
Teste 1

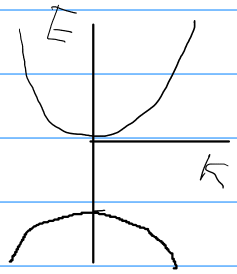
1. Explique sucintamente, do ponto de vista da estrutura de bandas de energia eletrónica:
a) Qual é a diferença entre metais, isoladores e semicondutores?
(1v)

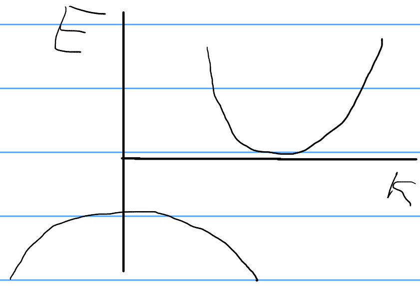
Nos metais as bandas de valência e de condução sobrepõe-se (ou coinciden, isto é, a banda de valência/condução é preenchida parcialmente). Nos semicondutores e isoladores existe um gap finito entre as bandas de condução e de valência, nos isoladores $E_g > 3.5eV$.

b) Qual é a diferença entre semicondutores com gap direto e indireto?
(1v)

Nos semicondutores com gap direto o mínimo da banda de condução e o máximo da banda de valência ocorrem no mesmo ponto da 1ª Zona de Brillouin. Isto não acontece nos semicondutores com gap indireto

dir.

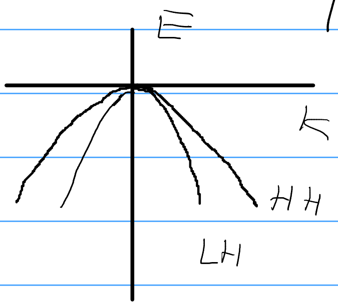




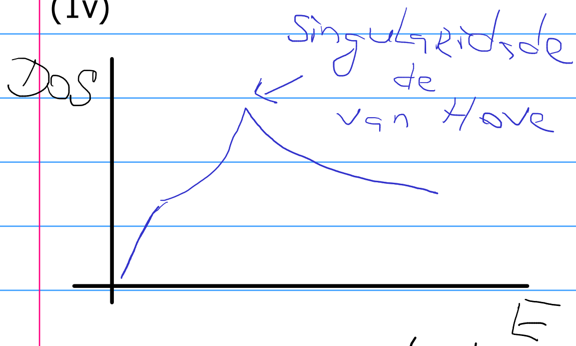
indir.

c) Qual é a diferença entre lacunas leves e pesadas?
(1v)

São lacunas que se criam em duas subbandas diferentes da banda de valência num semicondutor típico. Têm massas efetivas diferentes.

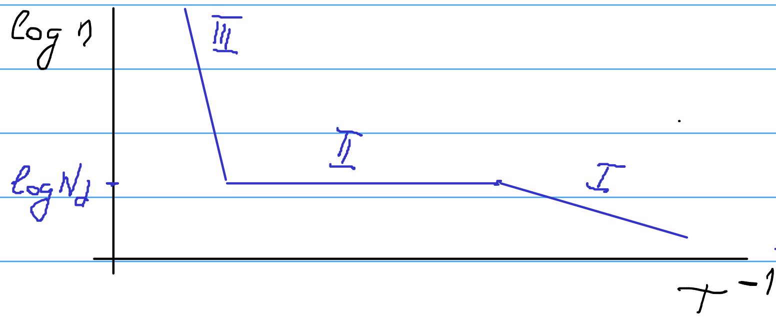


d) O que são singularidades de van Hove no espectro da densidade de estados electrónicos?
(1v)



Uma singularidade de van Hove é um ponto na 1ª Zona de Brillouin onde se verifica $\vec{\nabla}_{\vec{k}} E(\vec{k}) = 0$, para uma determinada banda. A energia $E' = E(\vec{k})|_{vH}$ corresponde um descontinuidade da função densidade de estados, $g(E')$ ou da sua derivada.

2. a) Apresente um gráfico qualitativo que demonstre a varação da concentração de eletrões na banda de condução em função da temperatura e comente brevemente sobre as regiões caraterísticas nesta variação.
(1v)



I - ionização parcial de dadores
II - ionização total de dadores
III - regime intrínseco

b) Que fatores determinam a condutividade elétrica dum condutor? Qual deles é determinante para a variação da condutividade com a temperatura: (1) nos semicondutores e (2) nos metais?
(1v)

De acordo com a fórmula de Drude,

$$\sigma(T) = e\,n(T)\,\mu(T),$$

ou seja, a variação da concentração de portadores de carga livres e da mobilidade determinam a variação $\sigma(T)$.
Nos semicondutores, a variação $n(T)$ é mais forte do que $\mu(T)$ (exceto na região II - ver pergunta anterior). Nos metais $n \approx$ const.

c) Avalie o numero de células unitárias do cristal no interior duma esfera de raio de Bohr efetivo.

c) Partindo da fórmula geral, deduza a forma explícita da função densidade de estados, $g(E)$, na banda de condução dum semicondutor tridimensional hipotético em que o espectro de energia dos eletrões tem a seguinte forma: $E(\vec{p}) = E_c + C|\vec{p}|$ onde C=const. **(2v)**

$E(\vec{k}) = c\hbar|\vec{k}|$; $\quad \nabla_{\vec{k}} E(\vec{k}) = c\hbar \frac{\vec{k}}{|\vec{k}|}$;

superfície de energia constante é uma esfera,

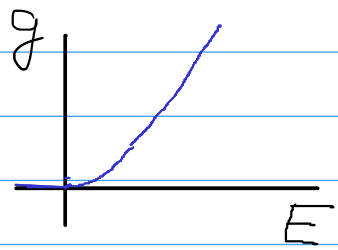
$$c\hbar|\vec{k}| = E' \rightarrow k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = \frac{E'^2}{c^2\hbar^2}$$

O raio da esfera, no espaço $\vec{k}$, é $\frac{E'}{c\hbar}$.

Aplicando a fórmula geral, temos:

$$g(E') = \frac{2}{(2\pi)^3} \int_{E(\vec{k})=E'} \frac{dA_{\vec{k}}}{|\nabla_{\vec{k}} E|} = \frac{2}{(2\pi)^3} 4\pi \left(\frac{E'}{c\hbar}\right)^2 \frac{1}{c\hbar} =$$

$$= \frac{1}{\pi^2 (c\hbar)^3} E'^2 \quad (E' > 0)$$



3. O espectro eletrónico na banda de condução e na banda de lacunas leves de um semicondutor com o *gap* suficientemente estreito pode ser descrito pela expressão proposta por Kane, que tem a seguinte forma:

$$E(\vec{k}) = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{1}{2}\left(-E_g \pm \sqrt{E_g^2 + \frac{8}{3}P^2 k^2}\right)$$

em que m_0 é a massa do electrão livre, E_g é a energia do *gap* e P é um parâmetro (o elemento de matriz do operador de momento linear, conhecido como o parâmetro de Kane). O sinal "+" ou "-" aplica-se aos electrões e lacunas leves, respectivamente.

a) Obtenha a expressão para a massa efectiva no fundo da banda de condução.

$E(\vec{k}) - E_c = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{E_g}{2}\left(-1 + \sqrt{1+\delta^2}\right)$; $\quad \delta^2 = \frac{8}{3}\frac{P^2 k^2}{E_g^2}$

É conveniente usar a expansão da raiz quadrada em série de Taylor: $\sqrt{1+\delta^2} \simeq 1 + \frac{\delta^2}{2} - \frac{\delta^4}{8} + \dots$

Assim,

$$E - E_c \simeq \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{E_g}{2}\left(\frac{4}{3}\frac{P^2 k^2}{E_g^2} - \frac{8}{9}\frac{P^4 k^4}{E_g^4} + \dots\right)$$

O segundo termo dentro dos parênteses pode ser desprezado para k suficientemente pequenos e

$$E - E_c \simeq \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2}\left(\frac{4}{3}\frac{P^2}{\hbar^2 E_g}\right),$$

ou seja,

$$(m^*)^{-1} = m_0^{-1} + \frac{4}{3}\frac{P^2}{\hbar^2 E_g}.$$

b) Calcule o quociente entre a massa efectiva e a massa do eletrão livre para o arseniete de gálio tomando $E_g = 1.42\,\text{eV}$ e $P = 1.0\times 10^{-7}\,\text{eV}\cdot\text{cm}$.

É conveniente reescrever a fórmula acima na forma:

$$\frac{m^*}{m_0} = \left(1 + \frac{4}{3}\frac{P^2 m_0}{\hbar^2 E_g}\right)^{-1}.$$

Substituindo os números, obtemos $\frac{m^*}{m_0} \simeq 0.07$.

4. Às temperaturas suficientemente baixas, a função de Fermi-Dirac pode ser aproximada por um degrau,

$$f_{FD}(E,E_F) = \frac{1}{1+\exp\left(\frac{E-E_F}{k_B T}\right)} \to \begin{cases} 1, & E < E_F \\ 0, & E > E_F \end{cases}$$

Usando esta aproximação:

a) Obtenha a relação entre a concentração de eletrões na banda de condução e o nível de Fermi, E_F.

Temos:

$$n = \int_{E_c}^{E_F} g(E)\,dE = \frac{2}{3}\frac{2^{1/2} m^{*3/2}}{\pi^2 \hbar^3}(E_F - E_c)^{3/2};$$

$$E_F - E_c = \frac{(3\pi^2 \hbar^2 n)^{2/3}}{2m^*} \qquad (*)$$

b) Calcule o valor de E_F (em eV), relativamente ao fundo da banda de condução para o arseniete de gálio se a concentração de eletrões for $n = 1.0\times 10^{18}\,\text{cm}^{-3}$. Tome a massa efectiva dos eletrões na banda de condução $m^* = 0.067 m_0$ e considere $T = 30\,\text{K}$.

Substituindo os números na fórmula $(*)$, temos

$$E_F - E_c \simeq 0.03\,\text{eV}$$

Verificamos que para $T = 30k$

$$E_F - E_C \gg k_B T,$$

o que justifica a aproximação "degrau".

5. O semicondutor GaAs tem (a $T = 300\,\mathrm{K}$) a energia do *gap* $E_g = 1.42\,\mathrm{eV}$, a massa efectiva de electrões livres $m^* = 0.065 m_0$, a constante dieléctrica $\varepsilon = 12.9$ e a constante da rede $a = 0.565\,\mathrm{nm}$.

a) Calcule o raio de Bohr efetivo que corresponde ao estado fundamental dum dador hidrogenóide.

A forma mais simples de calcular o raio de Bohr efetivo é através da sua relação com o raio de Bohr "genuino" (do átomo H),

$$a_B = \varepsilon\left(\frac{m_0}{m^*}\right) a_0 \;; \quad a_0 \approx 0.053\ \mathrm{nm}.$$

Assim temos, para GaAs, $a_B \approx 10\ \mathrm{nm}$.

b) Calcule a energia de ionização deste dador (em eV) e compare-a com a energia térmica.

À semelhança à alínea anterior, temos:

$$\{\text{energia de ionização}\} = R_y^* = \frac{1}{\varepsilon^2}\left(\frac{m_0}{m^*}\right) R_y \,;\; R_y = 13.6\,\mathrm{eV}$$

Então, $R_y^* \simeq 5.2\ \mathrm{meV}$.

c) Avalie o numero de células unitárias do cristal no interior duma esfera de raio de Bohr efetivo.

$$N_{\text{células}} = 4\,\frac{\frac{4\pi}{3} a_B^3}{a^3} = \frac{16\pi}{3}\left(\frac{a_B}{a}\right)^3 \simeq 9.3\times10^4$$

(um cubo de aresta a contém 4 células unitárias, cada uma com 2 átomos).