

Física de Semicondutores e Nanoestruturas (MIEF + MF 2019/20)

Teste 1

1. a) Enuncie o teorema de Bloch.

(1v)

b) Quais são as suas consequências que determinam a estrutura dos espectros eletrônicos de sólidos cristalinos?

(1v)

c) Comente sobre a aplicabilidade do teorema de Bloch e das suas consequências para semicondutores dopados.

(1v)

a) Num cristal perfeito, o Hamiltoniano comuta com o operador de translação, $T_{\vec{a}}$, em que \vec{a} é um vetor de translação da rede cristalina. Devido a este facto, a função de onda dum elétron descrito por este Hamiltoniano, tem a forma

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$$

em que $u_{\vec{k}}(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{a})$ é uma função periódica, chamada amplitude de Bloch.

b) Por consequência, o espectro de energia do elétron é uma função periódica de \vec{k} ,

$$E(\vec{k}) = E(\vec{k} + \vec{b})$$

em que \vec{b} é um vetor de translação da rede recíproca.

Isto significa que o espectro tem estrutura de bandas de largura finita e todos os estados fisicamente não equivalentes encontram-se dentro duma célula unitária (primária) da rede recíproca, chamada 1ª zona de Brillouin.

c) Se a concentração relativa (fração) de átomos de impureza é $\ll 1$, pode-se considerar que o teorema de Bloch e as suas consequências, são válidas. As impurezas podem introduzir apenas alguns estados locais.

2. Explique sucintamente:

a) Porque as superfícies de energia constante dos elétrons na banda de condução do silício são constituídas por 6 elipsoides?

(1v)

b) A massa efetiva dos elétrons na banda de condução do silício é anisotrópica, com dois valores principais desiguais. Porque isto não resulta em condutividade elétrica anisotrópica dum cristal do silício?

(1v)

a) O mínimo absoluto de $E(k)$ na banda de condução do silício ocorre num ponto fora do centro da 1ª zona de Brillouin, ao longo da direção (100) . Por simetria há 6 pontos equivalentes na 1ª zona de Brillouin, com as coordenadas

$$\pm \frac{\pi}{a}(1,0,0), \pm \frac{\pi}{a}(0,1,0), \pm \frac{\pi}{a}(0,0,1), \text{ e } \frac{\pi}{a} \leq \frac{2\pi}{a}.$$

As superfícies de $E = \text{const}$ com $E \geq E_{\text{min}}$ são, portanto, 6 elipsoides equivalentes, centrados nestes pontos no espaço k .

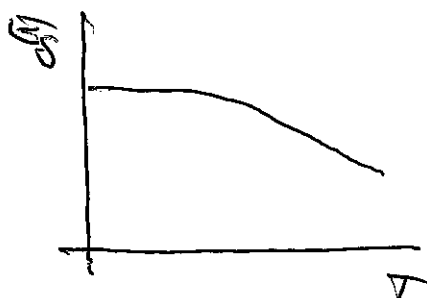
b) Apesar de a massa efetiva ser anisotrópica em cada um destes 6 elipsoides, o resultado de participação nas propriedades de transporte, dos elétrons dos 6 elipsoides (ou mínimos na banda de condução) é a isotropia destas propriedades.

Isto está de acordo com as considerações gerais de simetria, que prevêem que qualquer tensor físico (por exemplo, a condutividade, na ausência de campo magnético), reduz-se a um escalar num cristal cúbico.

3. Explique sucintamente:

a) A variação da largura do gap em função de temperatura (faça um desenho qualitativo).

(1v)



$E_g(T)$ diminui com T , como se mostra na figura. Acima de $T = 100K$ esta diminuição é praticamente linear.

A causa principal é a expansão térmica do cristal, o que diminui a sobreposição das funções de onda de átomos vizinhos.

b) Esperaria alguma variação da largura do gap para um semiconductor sujeito a uma compressão hidrostática? Qual?

(0.5v)

Sim. A compressão faz diminuir a constante da rede, pelo que E_g deve aumentar, pelo contrário da expansão térmica.

c) A origem física da interação spin-órbita e o seu efeito principal na estrutura de bandas.

Este efeito é maior para o silício ou para o germânio? Porque?

(1.5v)

A interação spin-órbita significa acoplamento de momentos magnéticos associados ao spin e ao momento angular orbital. Esta interação levanta (parcialmente) a degenerescência de níveis atômicos em relação aos números quânticos S_z e m . Os níveis de energias, levando em conta a interação SO, são classificados de acordo com valores do número quântico $J = |L - S|, \dots, L + S$, sendo degenerados em respeito a J^2 . Nos semicondutores típicos, o efeito spin é principalmente o desdobramento das bandas de valência no ponto Γ ($J = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$). O efeito aumenta com o número atômico, por isso é maior para Ge do que para Si.

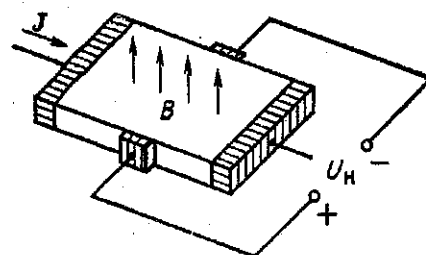
4. A figura exemplifica uma montagem para medição do efeito Hall.

a) Na situação mostrada na figura, determine o tipo de portadores de carga maioritários.

(1v)

b) Como é possível determinar a concentração de portadores de carga maioritários num semiconductor dopado com dados a partir de medições do efeito Hall?

(1v)



a) CONSIDERANDO O SENTIDO DE CORRENTE E A POLARIDADE DA d.d.p. de HALL, APRESENTADOS NA FIGURA, OS PORTADORES DE CARGA MAIORITÁRIOS SÃO LACUNAS.

b) A CONSTANTE DE HALL, DEFINIDA POR $R_H = \frac{V_H}{j \cdot B \cdot e}$, DIRETAMENTE DA

A CONCENTRAÇÃO DE PORTADORES DE CARGA MAIORITÁRIOS,

$$n = \frac{1}{e |R_H|} \quad (\text{considerando } \mu_H \approx 1).$$

NA IMPLEMENTAÇÃO APRESENTADA, É PRECISO MEDIR A d.d.p. de HALL, V_H , A INTENSIDADE DE CORRENTE, I , A MAGNITUDE DO CAMPO MAGNÉTICO, B , E A ESPESURA DE AMOSTRA, d . A densidade de corrente é

$$j = \frac{I}{d \cdot l},$$

l é a largura da amostra (a qual se torna desnecessária para calcular R_H).

5. O espectro electrónico na banda de condução de um semiconductor com o gap suficientemente estreito, pode ser descrito pela expressão proposta por Kane, que tem a seguinte forma:

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

em que m_0 é a massa do eletrão livre, E_g é a energia do gap e P é um parâmetro (chamado parâmetro de Kane).

- Deduza a expressão para a massa efectiva no fundo da banda de condução e calcule o seu valor numérico (em unidades de m_0) admitindo que $E_g = 1$ eV e $P = 1 \cdot 10^{-29}$ eV·cm.
- Admitindo que o parâmetro de Kane é independente da temperatura, como deve variar a massa efectiva em função da temperatura?

(3v)

a) Para $\hbar^2 k^2 \ll E_g^2$, a expansão da raíz quadrada dá!

$$\sqrt{E_g^2 + \frac{8}{3} P^2 k^2} \approx E_g + \frac{4}{3} \frac{P^2 k^2}{E_g}$$

Assim,

$$E(\vec{k}) = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2} \left(\frac{1}{m_0} + \frac{4}{3} \frac{P^2}{E_g \hbar^2} \right)$$

$$\Rightarrow \frac{1}{m^*} = \frac{1}{m_0} + \frac{4}{3} \frac{P^2}{E_g \hbar^2}$$

$$\frac{m^*}{m_0} = \frac{1}{1 + \frac{4}{3} \frac{m_0 P^2}{E_g \hbar^2}} \approx 0.8$$

onde substituímos $m_0 = 9.1 \cdot 10^{-31}$ kg, $P = 1.6 \cdot 10^{-29}$ J·m, $E_g = 1.6 \cdot 10^{-19}$ J e $\hbar = 1.05 \cdot 10^{-34}$ J·s

b) Se P não depende de temperatura e E_g diminuir com a temperatura, temos da fórmula em cima que m^* também diminuir com T .

6. Admita que numa amostra de semicondutor a concentração intrínseca de portadores de carga é de $4 \mu\text{m}^{-3}$. Sem alterar a temperatura, introduzem-se na amostra átomos de impureza do tipo aceitador, na concentração de $6 \mu\text{m}^{-3}$, que ficam totalmente ionizados.

a) Quais serão as concentrações dos eletrões e das lacunas depois de o sistema chegar ao equilíbrio térmico?

b) Diga, justificando, se a aproximação da ionização total dos aceitadores é boa na situação considerada.

(3v)

9) Admitindo que os ACEITADORES SÃO TOTALMENTE IONIZADOS, A EQUAÇÃO DE NEUTRALIDADE LOCAL É!

$$(1) \quad p = n + N_A, \quad N_A - \text{concentração de aceitadores}$$

Admitindo que podemos usar a estatística de Boltzmann quer para os eletrões quer para as lacunas, temos

$$(2) \quad np = n_i^2, \quad n_i - \text{concentração intrínseca}$$

Das equações (1) e (2) temos:

$$p^2 - N_A p - n_i^2 = 0$$

$$p = \frac{N_A}{2} + \sqrt{\frac{N_A^2}{4} + n_i^2} = 8 \mu\text{m}^{-3}$$

e a concentração dos eletrões minoritários

$$n = n_i^2 / p = 2 \mu\text{m}^{-3}$$

b) Como $p = N_A e^{-\frac{E_F - E_V}{kT}}$, os níveis de Fermi no semicondutor intrínseco e dopado comparam-se da seguinte forma:

$$\frac{E_F^{(i)} - E_V}{E_F^{(p)} - E_V} = \ln \frac{p}{n_i} = \ln 2$$

(a diferença é pequena).

Assim, provavelmente muitos dos aceitadores são preenchidos com eletrões, i.e. não ionizados. A aproximação acima usada não deve ser muito boa.

7. Considere a difusão de portadores de carga no espaço, na presença de um gradiente do nível de Fermi. Admita que o espectro eletrônico é isotrópico e parabólico.

a) Deduza a equação de difusão a partir da equação cinética de Boltzmann e obtenha o coeficiente de difusão dos portadores de carga, D . [Sugestão: use o ansatz $\delta f = (\vec{v} \cdot \vec{\nabla} E_F) g(\vec{p})$]

b) Demonstre como o coeficiente de difusão depende da temperatura se o mecanismo de espalhamento de elétrons principal é por íons de impureza, com $\tau_p(p) = Ap^3$, $A = \text{const.}$

(4v)

a) NA PRESENÇA DE UM GRADIENTE DE POTENCIAL químico, a equação de Boltzmann é:

$$\vec{v} \cdot \vec{\nabla} f = - \frac{f - f_0}{\tau_p}$$

O termo do lado esquerdo escrevemos:

$$\vec{\nabla} f = \frac{\partial f}{\partial E_F} \vec{\nabla} E_F \approx - \frac{\partial f_0}{\partial E_F} \vec{\nabla} E_F$$

porque $\vec{\nabla} E_F$ é considerado pequeno e $f \approx f_0$, f_0 é a função de Fermi-DIRAC que depende de $(E - E_F)$.

Usando a substituição superior, temos

$$g(\vec{p}) = \tau_p \frac{\partial f_0}{\partial E}$$

e o fluxo de partículas é:

$$\begin{aligned} \vec{J} &= \frac{q}{(2\pi\hbar)^3} \int \vec{v} (\vec{v} \cdot \vec{\nabla} E_F) \tau_p \frac{\partial f_0}{\partial E} d\vec{p} = \\ &= \left\{ \frac{q}{3} \frac{1}{(m^*)^2 (2\pi\hbar)^3} \int_0^\infty p^4 \tau_p \frac{\partial f_0}{\partial E} dp \right\} \vec{\nabla} E_F \\ &= \left\{ \dots \right\} \frac{\partial E_F}{\partial n} \Big|_{T=\text{const}} \vec{\nabla} n \equiv -D \vec{\nabla} n \end{aligned}$$

onde

$$D = - \frac{q}{3} \frac{1}{(m^*)^2 (2\pi\hbar)^3} \int_0^\infty p^4 \tau_p \frac{\partial f_0}{\partial E} dp \frac{\partial E_F}{\partial n} \Big|_T$$

é o coeficiente de difusão.

Admitindo a estatística de Boltzmann, (8)
temos:

$$D = \frac{8\pi}{3} \frac{1}{(2\pi\hbar)^3 (m^*)^2 k_B T} \int_0^\infty p^4 e_p f_0 dp = \frac{k_B T}{n}$$

porque

$$f_0 = e^{\frac{E_F - E}{k_B T}} \quad e \quad n = N_c e^{\frac{E_F - E}{k_B T}},$$

$$\left. \frac{\partial E_F}{\partial n} \right|_{T=\text{const}} = \left[\left(\frac{\partial n}{\partial E_F} \right)_T \right]^{-1} = \frac{k_B T}{n}.$$

Podemos reescrever a expressão para D na forma:

$$(*) \quad D = \frac{\sigma}{e^2} \cdot \frac{k_B T}{n} = \frac{e n \mu}{e^2} \cdot \frac{k_B T}{n} = \frac{k_B T}{e} \mu$$

onde σ é a condutividade e μ a mobilidade.
A relação (*) é conhecida como a relação de Einstein.

b) Pela expressão para D temos:

$$\begin{aligned} D &\propto \frac{1}{n} \int_0^\infty e^{-\frac{E_F - E}{k_B T}} e^{-\frac{p^2}{2m^*k_B T}} p^4 \cdot p^3 dp \\ &= \frac{(2m^*k_B T)^4}{2N_c} \int_0^\infty e^{-x} x^3 dx = \boxed{x = \frac{p^2}{2m^*k_B T}} \\ &= 3 \frac{(2m^*k_B T)^4}{N_c} \sim T^{5/2}. \end{aligned}$$

O mesmo resultado poderia ser obtido a partir da relação de Einstein sabendo que $\mu \sim T^{3/2}$ para o caso aqui considerado.

Formulário

$$n = N_c \cdot F_{1/2} \left(\frac{E_F - E_c}{k_B T} \right) \approx N_c \exp \left(\frac{E_F - E_c}{k_B T} \right); \quad p \approx N_v \exp \left(\frac{E_v - E_F}{k_B T} \right); \quad n_i = \sqrt{N_c N_v} \exp \left(-\frac{E_g}{2k_B T} \right)$$

$$N_c (\text{ou } N_v) = 2 \frac{(\nu m^* k_B T)^{3/2}}{(2\pi)^{3/2} \hbar^3} = 2.5 \times 10^{19} \left(\frac{T}{300\text{K}} \right)^{3/2} \left(\frac{\nu m^*}{m_0} \right)^{3/2} [\text{cm}^{-3}]; \quad E_{F_i} = \frac{E_c + E_v}{2} + \frac{k_B T}{2} \ln \frac{N_v}{N_c};$$

$$E_F = \frac{E_d + E_c}{2} + \frac{k_B T}{2} \ln \frac{N_d}{\beta_d N_c}; \quad np = n_i^2; \quad N_d^+ = \frac{N_d}{1 + \beta_d \exp \left(\frac{E_F - E_d}{k_B T} \right)}$$

$$E_d = E_c - \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{e^2}{2\epsilon a_B}; \quad a_B = (4\pi\epsilon_0) \frac{\epsilon \hbar^2}{m^* e^2};$$

$$\sigma = \rho^{-1} = e(n\mu_e + p\mu_h); \quad \mu = e\langle \tau_p \rangle / m^*; \quad \langle \tau_p \rangle = \int \tau_p(p) f_0 p^2 dp / \int f_0 p^2 dv; \quad \vec{j} = -D \vec{\nabla} n$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} + \vec{\mathfrak{T}} \frac{\partial f}{\partial \vec{p}} = -\frac{f - f_0}{\tau_p}; \quad f_0(E) = \exp \left(\frac{E_F - E}{k_B T} \right), \quad E = E_c + \frac{p^2}{2m^*}; \quad \vec{j} = \frac{2}{(2\pi\hbar)^3} \int \vec{v} f(\vec{p}) d^3 p$$