Problemas de electrões em sólidos

Ricardo Mendes Ribeiro

28 de Abril de 2022

Electrões em sólidos

1. Considere um electrão num potencial fraco a uma dimensão e periódico: $V(x) = V(x+a)$. Pode-se escrever o potencial na forma

$$V(x) = \sum_G e^{iGx} V_G$$

em que a soma é sobre os vectores da rede recíproca, $G = 2\pi n/a$ e $V_G^* = V_{-G}$ assegura que o potencial é real.

Perto da fronteira da zona de Brillouin ($k \approx \pi/a$), podemos escrever a função de onda na forma:

$$\psi = Ae^{ikx} + Be^{i(k+G)x}$$

em que G é um vector da rede recíproca tal que $|k|$ é próximo de $|k+G|$.

   (a) Mostre que, se k está exactamente na fronteira da zona de Brillouin,

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V_0 \pm |V_G|$$

   (b) Considere agora k próximo mas não exactamente na fronteira da zona de Brillouin. Escreva uma expressão para a energia $E(k)$ correcta até à ordem $(\delta k)^2$, em que δk é a diferença de k para a fronteira.

   (c) Calcule a massa efectiva dum electrão nas condições da alínea anterior.

2. Considere uma rede periódica $\{\boldsymbol{R}\}$ e uma função $\rho(\boldsymbol{x})$ que tem a periodicidade da rede: $\rho(\boldsymbol{x}) = \rho(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{R})$. Mostre que se pode escrever

$$\rho(\boldsymbol{x}) = \sum_G e^{i\boldsymbol{G}\cdot\boldsymbol{x}} \rho_{\boldsymbol{G}}$$

em que $\boldsymbol{G}$ são os vectores da rede recíproca.

3. No primeiro problema vimos que um potencial periódico a uma dimensão abre um hiato nas bandas de modo que não há estados próprios em ondas planas entre $E_0(G/2) - |V_G|$ e $E_0(G/2) + |V_G|$. Mas nessas energias proibidas pode haver estados

de ondas evanescentes. Assuma uma onda na forma:

$$\psi = e^{ikx - \kappa x}$$

com $0 < \kappa \ll k$ e real.

Determine κ em função da energia para $k = G/2$.

4. Considere electrões numa rede em forma de pente de funções delta

$$V(x) = aU \sum_n \delta(x - na)$$

   (a) Mostre que entre as funções delta, um estado próprio de energia E é $e^{\pm i q_E x}$ com

   $$q_E = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

   (b) O teorema de Bloch diz que:

   $$\psi(x) = e^{ikx} u(x)$$

   em que u é periódico na célula unitária. Mostre que

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

   Como o hamiltoneano tem simetria de reversão de tempo ($H = H^*$), podemos escrever a função de onda real e fica:

   $$\psi(x) = A \sin(q_E x) + B \cos(q_E x) \qquad\qquad 0 < x < a$$

   Use a continuidade da função de onda para verificar que

   $$B = e^{-ika}[A \sin(q_E a) + B \cos(q_E a)]$$

   e

   $$A - e^{-ika}[A \cos(q_E a) - B \sin(q_E a)] = \frac{2maUB}{q_E \hbar^2}$$

   (c) Resolva essas duas equações para obter:

   $$\cos(ka) = \cos(q_E a) + \frac{mUa}{\hbar^2 q_E} \sin(q_E a)$$

   (d) Determine o tamanho do hiato que se forma na fronteira da zona de Brillouin, para pequenos potenciais U.

5. Explique o seguinte:

   (a) O Sódio, que tem dois átomos por célula convencional numa rede bcc, é um metal.

   (b) O cálcio tem quatro átomos numa célula da rede convencional fcc, e é um metal.

   (c) O diamante tem oito átomos numa célula da rede convencional fcc, com uma base, é um isolante, enquanto o silício e o germânio, com redes semelhantes, são semicondutores.

   (d) Porque é que o diamante é transparente?

6. Um electrão perto do topo da banda de valência tem uma energia

$$E = -10^{-37}|\boldsymbol{k}|^2$$

   em que a energia está em joules e o momento em m^{-1}. Remove-se um electrão de um estado

$$\boldsymbol{k} = 2 \times 10^8 \boldsymbol{e}_x \ \mathrm{m}^{-1}$$

   Calcule para a lacuna que fica,

   (a) a massa efectiva

   (b) a energia

   (c) o momento

   (d) a velocidade

   (e) Se houver uma densidade de $p = 10^5 \ \mathrm{m}^{-3}$ lacunas com aproximadamente esse momento, calcule a densidade de corrente e o seu sinal.

7. Um semicondutor de hiato directo foi dopado de modo a produzir uma densidade de 10^{23} electrões/m^3. Calcule a densidade de lacunas à temperatura ambiente dado um hiato da banda de 1 eV e uma massa efectiva dos portadores nas bandas de condução e de valência de 0.25 e 0.4 massas do electrão, respectivamente.

8. Considere que as lacunas num dado semicondutor têm mobilidade μ_h e os electrões têm uma mobilidade μ_e.

   A condutividade total do semicondutor será:

$$\sigma = e(n\mu_e + p\mu_h)$$

   em que n e p são as densidades de electrões na banda de condução e de lacunas na banda de valência, respectivamente. Mostre que, independentemente da dopagem, o máximo da condutividade que pode ser alcançada é

$$\sigma = 2en_i\sqrt{\mu_e\mu_h}$$

em que n_i é a densidade intrínseca de portadores.

Para que valor de $n - p$ se alcança esse máximo de condutividade?

9. Um poço de potencial foi formado por uma camada de GaAs the L nm de espessura, intercalada entre duas camadas de $\mathrm{Ga}_{1-x}\mathrm{Al}_x\mathrm{As}$. Assuma que o hiato de banda do $\mathrm{Ga}_{1-x}\mathrm{Al}_x\mathrm{As}$ é substancialmente superior ao do GaAs.

   A massa efectiva do electrão no GaAs é de $0.068m_e$ e a da lacuna é $0.45m_e$.

   (a) Faça um diagrama da forma do potencial para os electrões e lacunas

   (b) Que valor aproximado de L é necessário para que o hiato da banda do poço de potencial seja 0.1 eV maior do que o do GaAs?

   (c) Para que poderá ser útil esta estrutura?

10. Considere um poço quântico do tipo do descrito no exercício anterior. Calcule a densidade de estados para os electrões e as lacunas no poço de potencial.

11. Considere um fio quântico, que é um fio unidimensional de GaAs embebido em AlGaAs. Pode considerar a secção do fio quadrada, com 30 nm de lado. Descreva a densidade de estados para os electrões e as lacunas dentro do fio quântico.