Física de Semicondutores e Nanoestruturas (MIEF 2018/19)

Teste 1

1. Explique sucintamente:

a) Qual é a diferença entre os semicondutores com o *gap* direto e indireto?
(0.5v)
Num semicondutor com gap direto o mínimo principal da banda de condução e o máximo principal da banda de valência ocorrem no mesmo ponto no espaço $\vec{k}$.

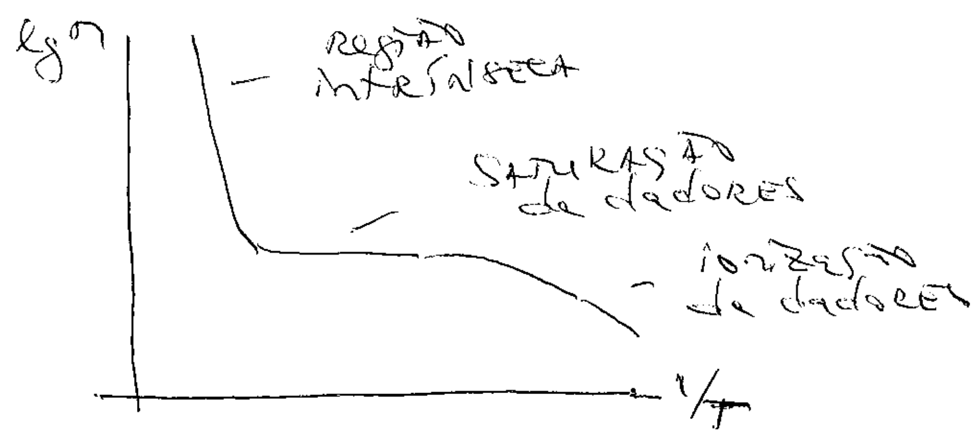
b) O que é energia de Fermi?
(0.5v)
Energia de Fermi é o potencial químico do gás eletrónico. A T=0 separa os estados preenchidos e os vazios.

c) O que é uma banda de impurezas?
(0.5v)
Uma banda de impurezas é uma faixa de energias contendo estados eletrónicos permitidos que originam de átomos de impureza com alguma sobreposição das funções de onda. Isto acontece quando a diztância média entre os átomos de impureza é comparável com o raio de Bohr efetivo.

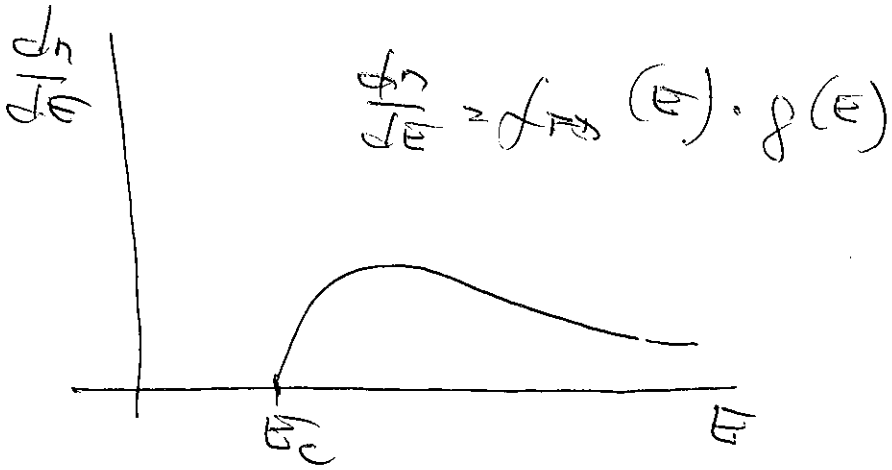
. .

e) O que é uma singularidade de van Hove?
(0.5v)
Uma singularidade de van Hove é um ponto no espaço $\vec{k}$ em que o espetro eletrónico $E(\vec{k})$ é tal que $\nabla_{\vec{k}} E(\vec{k}) = 0$. Estes pontos podem ser de dois tipos: extremos ou pontos de sela. Nestes pontos diverge a densidade de estados ou a sua derivada em ordem à energia.

2. Desenhe um gráfico qualitativo para:
a) A variação da concentração de portadores de carga maioritários num semicondutor dopado, em função de temperatura.
(1v)

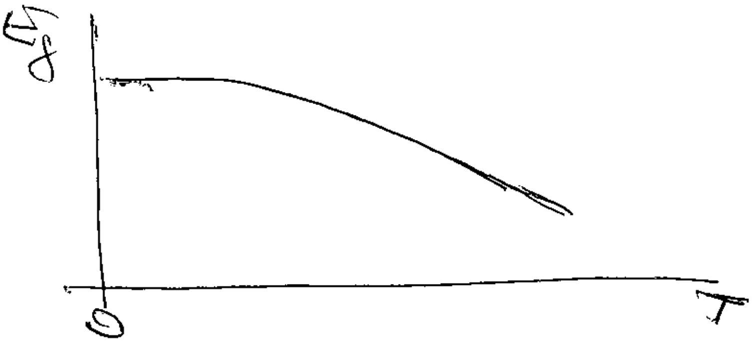


b) A variação da densidade de eletrões por intervalo de energia na banda de condução dum semicondutor intrínseco, em função de energia.
(1v)



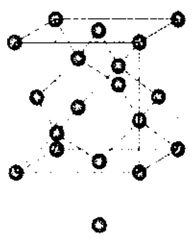
$$\frac{dn}{dE} = f_{FD}(E)\cdot g(E)$$

c) A variação da largura do gap em função de temperatura (Explique a causa principal desta variação).
(1v)



Expanção térmica é a razão principal de $E_g(T)$.

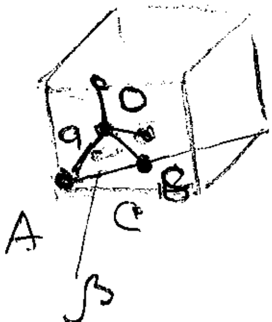
3. a) Explique sucintamente a estrutura cristalina do diamante (faça um desenho explicativo). Qual é a rede de Bravais que lhe corresponde?
(1v)



É composta por duas redes cúbicas de faces centradas (fcc), deslocadas uma em relação à outra por ¼ da diagonal do cubo.
A rede de Bravais subjacente é fcc.

b) Mostre que o ângulo que fazem as ligações entre dois átomos adjacentes nessa estrutura é igual a arccos (-1/3) ≈109°.
(2v)

Método 1



No triângulo AOB

$AB = b = \frac{c}{\sqrt{2}}$, $AO = a = \frac{c\sqrt{3}}{4}$

(c - aresta do cubo)

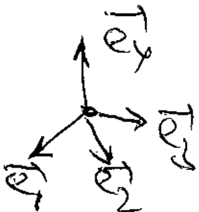
Pelo teorema dos cossenos temos:

$$b^2 = 2a^2(1-\cos\beta)$$

$$\frac{8}{3}\cancel{a}^2 = 2\cancel{a}^2(1-\cos\beta);$$

$$\cos\beta = -\frac{1}{3}$$

Método 2



Estes 4 vetores apontam para os vizinhos do átomo O;

$$\sum_{i=1}^{4} \vec{e}_i = 0$$

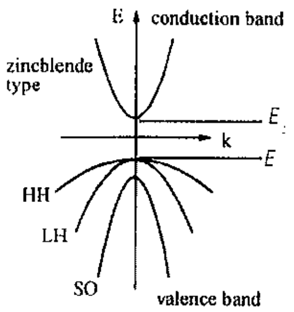
Levantando ao quadrado temos:

$$\sum_{i=1}^{4} (\vec{e}_i)^2 + 2\sum_{i\neq j} \vec{e}_i\cdot\vec{e}_j = 0$$

$$4 + 12\cos\beta = 0$$

c) Faça um esboço da estrutura de bandas do arseniete de gálio (as curvas de dispersão, $E(k)$, para as bandas de valência e de condução) na vizinhança do ponto Γ, na 1-a zona de Brillouin. Qual é o efeito da interação spin-órbita nesta estrutura de bandas?

(1v)



O efeito spin-órbita é responsável pelo desdobramento das bandas designadas SO (correspondente ao momento angular total $J = 1/2$ para os eletrões com $\vec{k} \approx 0$) e as bandas correspondentes a lacunas leves e pesadas ($J = 3/2$). Sem este efeito, as três bandas seriam degeneradas no ponto Γ.

d) Porque é que as lacunas na banda de valência, na vizinhança do ponto Γ podem ser consideradas como partículas com spin 3/2?

(1v)

O mais correto seria dizer que é o momento angular total (spin mais o momento orbital) é igual a 3/2. No entanto, considerando as lacunas no ponto Γ onde elas têm degenerescência 4 (e aproximadamente na vizinhança do ponto Γ), podemos considerá-las como partículas efetivas com spin 3/2. .

4. A velocidade de deriva em semicondutores típicos satura-se num valor da ordem de 10^5 m·s^{-1} quando o campo elétrico atinge um valor da ordem de 10^6 V·m^{-1}. Faça uma estimativa do tempo de relaxação médio admitindo que a massa efectiva do eletrão é $m^* = 0.1 \cdot m_0$ (m_0 é a massa do eletrão livre).

(2v) A mobilidade é:

$$\mu = \frac{v_d}{\mathcal{E}} = 0.1 \frac{m^2}{V \cdot s} = 10^3 \frac{cm^2}{V \cdot s}$$

Por outro lado, $\mu = e\tau_p / m^*$.

Então, $\tau_p = \dfrac{m^* \cdot \mu}{e} \approx 5.5 \cdot 10^{-14}$ s.

5. Usando o modelo de Drude-Sommerfeld, demonstre como varia com a temperatura a mobilidade de portadores de carga livres, $\mu_e(T)$, se a secção eficaz de *scattering* depende da velocidade do eletrão como $S = av^{-4}$ (a = const).

(3v) O tempo de relaxação microscópico:

$$\tau_p = \left[S(v) \cdot v \cdot N_i\right]^{-1} \sim v^3$$

$$\langle \tau_p \rangle = \frac{\int_0^\infty \tau_p f_0 v^2 dv}{\int_0^\infty f_0 v^2 dv} \sim \frac{\int_0^\infty v^3 f_0 v^2 dv}{\int_0^\infty f_0 v^2 dv} =$$

$$= \frac{\int_0^\infty e^{-\frac{m^* v^2}{2k_BT}} v^5 dv}{\int_0^\infty v^2 e^{-\frac{m^* v^2}{k_BT}} dv} = \left(\frac{2k_BT}{m^*}\right)^{3/2} \frac{\int_0^\infty e^{-x^2} x^5 dx}{\int_0^\infty e^{-x^2} x^2 dx} \sim T^{\frac{3}{2}}$$

6. Admitindo que a constante dieléctrica para o arseniete de gálio é $\varepsilon = 10.9$ e a massa efectiva dos eletrões na banda de condução é $m^* = 0.067 m_0$, faça uma estimativa da temperatura acima da qual podemos considerar que os dadores neste semicondutor são completamente ionizados.
(2v)

Energia de ionização dum dador:

$$Ry^* = \left(\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\right)\frac{e^2}{2\varepsilon a_B} = \frac{Ry}{\varepsilon^2}\left(\frac{m^*}{m_0}\right)$$

$$= 13.6\,eV \frac{1}{10.9^2} \cdot 0.067 \simeq 7.7\,meV$$

A temperatura:

$$T \gtrsim \frac{7.7\,meV}{k_B} \simeq 90\,K$$

7. Admita que numa amostra de semicondutor a concentração intrínseca de portadores de carga é de $8\,\mu m^{-3}$. Sem alterar a temperatura, introduzem-se na amostra átomos de impureza do tipo dador, na concentração de $12\,\mu m^{-3}$, que ficam totalmente ionizados. Quais serão as concentrações dos electrões e das lacunas depois de o sistema chegar ao equilíbrio térmico?
(3v)

Temos: $n_i = 8\,\mu m^{-3}$, $N_d = 12\,\mu m^{-3}$.

No equilíbrio térmico, temos a neutralidade local:

$$n = p + N_d \qquad (1)$$

em que n e p são relacionados por

$$np = n_i^2 \qquad (2)$$

(admitindo que o gás electrónico não é degenerado).

Das eqs. (1) e (2) temos:

$$n - \frac{n_i^2}{n} = N_d .$$

Resolvendo esta equação quadrática, obtemos:

$$n = 16\,\mu m^{-3}, \quad p = 4\,\mu m^{-3}.$$