Universidade do Minho

Problemas de Física da Matéria Condensada – Série 6

1- Num cristal com rede unidimensional os eletrões estão sujeitos ao respetivo potencial periódico tal que o espetro de energia $\varepsilon = \varepsilon(k)$ das duas bandas de mais baixa energia tem a seguinte forma:

$$\begin{aligned} \varepsilon(k) &= 2t - 2t\cos(ka) \quad - \quad \text{banda } 1 \\ \varepsilon(k) &= 6t + 2t\cos(ka) + U \quad - \quad \text{banda } 2\,. \end{aligned}$$

Aqui $U \ll 4t$, $t > 0$, $k \in \left[-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\right]$, no estado fundamental a banda 1 está totalmente preenchida com eletrões e a banda 2 vazia e usa-se a convenção de que as curvaturas podem ser positivas ou negativas enquanto que as massas efetivas são sempre positivas.

a) Represente graficamente os espetros de energia das duas bandas em função de k para $k \in \left[-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\right]$ e indique qual é a banda de valência e qual é a banda de condução. Justifique a sua resposta.

b) Indique quais são os valores de k que correspondem aos extremos da banda de valência e os valores de k que correspondem aos extremos da banda de condução bem como os valores das energias E_v e E_c, respetivamente, desses extremos.

c) Considere que à temperatura ambiente o presente cristal é um semi-condutor. Indique qual o valor do hiato de energia E_g e se na absorção de fotões este se refere a transições diretas ou indiretas. Se forem indiretas, calcule o vetor de onda a obter pelos eletrões por absorção de fonões.

d) Calcule a curvatura e a massa efetiva do espetro de energia da banda de valência para vetores de onda muito perto do valor de k positivo que corresponde a um dos extremos dessa banda e indique se se refere a eletrões ou a lacunas. Justifique a sua resposta.

e) Derive a curvatura e a massa efetiva do espetro de energia da banda de condução para vetores de onda muito perto do valor de k positivo que corresponde a um dos extremos dessa banda e indique se se refere a eletrões ou a lacunas. Justifique a sua resposta.

f) Obtenha uma expressão para o espetro de energia da banda de valência e uma expressão para o espetro de energia da banda de condução válidas para vetores de onda muito perto dos valores de k que correspondem aos extremos dessas bandas. Estas expressões devem incluir as energias desses extremos e as correspondentes massas efetivas calculadas nas alíneas anteriores.

2- Considere um cristal com rede unidimensional como o do problema 1, mas para o qual o espetro das duas bandas de mais baixa energia tem antes a forma:

$$\begin{aligned} \varepsilon(k) &= t - t\cos(ka) \quad - \quad \text{banda } 1 \\ \varepsilon(k) &= 3t + t\cos(2ka) + U \quad - \quad \text{banda } 2\,. \end{aligned}$$

Aqui $U \ll 2t$, $t > 0$, $k \in \left[-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\right]$, no estado fundamental a banda 1 está totalmente preenchida com eletrões e a banda 2 vazia e usa-se a mesma convenção para as curvaturas e massas efetivas que no problema 1. Considere ainda que no zero absoluto a banda de valência está completamente preenchida e a banda de condução vazia e que à temperatura ambiente o cristal é um semi-condutor. Responda às perguntas das alíneas a)-g) do problema 1 para o caso das duas bandas do presente problema.

3- Considere um semi-condutor para o qual a energia $\varepsilon > E_c$ da banda de condução e a energia $\varepsilon < E_v$ da banda de valência são tais que $\varepsilon - \mu \gg k_B T$ e $\mu - \varepsilon \gg k_B T$, respetivamente, onde μ é o potencial químico. Considere ainda que os correspondentes espetros de energia das bandas de condução e de valência perto dos seus extremos são da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \varepsilon(\vec{k}) &= E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} \text{ para } \varepsilon > E_c \\ \varepsilon(\vec{k}) &= E_v - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_h} \text{ para } \varepsilon < E_v\,. \end{aligned}$$

Aqui $k = |\vec{k}|$, o zero do vetor de onda $\vec{k}$ foi escolhido para coincidir com os extremos das bandas e m_e e m_h são massas efetivas.

a) Tomando em consideração que $\varepsilon - \mu \gg k_B T$ no caso de energias ε da banda de condução e $\mu - \varepsilon \gg k_B T$ no caso de energias ε da banda de valência, determine expressões simplificadas para as correspondentes distribuições de Fermi-Dirac $f_e(\varepsilon)$ e $f_h(\varepsilon)$, respetivamente, válidas para essas gamas de energias, partindo das suas expressões gerais:

$$f_e(\varepsilon) = \frac{1}{1 + e^{(\varepsilon-\mu)/k_B T}} \text{ e } f_h(\varepsilon) = 1 - f_e(\varepsilon)$$

b) Quais as modificações que devem ser feitas na expressão da densidade de estados de eletrões livres de massa m derivada na Série 3 e fornecida aqui nos dados auxiliares, para se obter as densidades de estados a usar no presente caso para os estados da banda de condução e da banda de valência, respetivamente?

O que justifica as semelhanças básicas com a expressão da densidade de estados de eletrões livres?

c) Com base na forma das expressões obtidas para $f_e(\varepsilon)$ e $f_h(\varepsilon)$ na alínea a), e embora as expressões dos espetros de energia acima dadas sejam válidas para energias $\varepsilon = \varepsilon(\vec{k})$ correspondentes a vetores de onda $\vec{k}$ perto dos extremos das bandas, porque é que para se calcular as concentrações de eletrões e lacunas nas seguintes alíneas se pode e deve considerar que são válidas para energias $\varepsilon \in [E_c, \infty]$ e $\varepsilon \in [-\infty, E_v]$, respetivamente?

d) Derive a expressão da concentração de eletrões n na banda de condução em função da temperatura absoluta T.

e) Determine a expressão da concentração de lacunas p na banda de valência em função da temperatura absoluta T.

4- Considere que no caso do semi-condutor do problema 3 as concentrações n e p são intrínsecas, pelo que são designadas por n_i e p_i. Com base nos resultados do problema 3, responda às seguintes questões:

a) Determine uma expressão para n_i e p_i que não dependa do potencial químico μ e envolva o hiato de energia $E_g = E_c - E_v$ do semi-condutor.

b) Derive uma expressão para o potencial químico μ em termos de E_g, temperatura T e quociente m_h/m_e.

5- Considere os dois cristais com rede unidimensional estudados nos problemas 1 e 2, a que aqui chamamos cristal I e cristal II, respetivamente, a temperaturas muito baixas tais que $k_B T \ll E_g$ onde E_g é o respetivo hiato de energia, e que ambos os cristais são muito puros, pelo que a sua concentração de impurezas se pode considerar nula.

a) Mostre que as concentrações de eletrões n e de lacunas p são e iguais para ambos os cristais e dadas por $n = p = 2\left(\frac{k_B T}{4\pi t a^2}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{U}{2k_B T}}$.

b) Considerando que o zero de energia corresponde ao topo da banda de valência, derive a expressão do potencial químico μ para ambos os cristais e confirme que, não obstante as concentrações de portadores de carga serem as mesmas, o potencial químico tem diferentes valores para cada um deles a temperaturas $T > 0$ muito baixas.

c) Indique se para as presentes temperaturas T muito baixas o potencial químico de cada um dos dois cristais decresce com T, não varia com T ou cresce com T e porquê.

6- Considere um filme de material supercondutor na forma de uma placa de espessura δ muito fina. A placa é perpendicular ao eixo OX, ao longo do qual se aplica um campo magnético associado a uma indução magnética B_a. Dentro da placa, B_a dá origem a uma indução magnética $B(x) \leq B_a$, a qual obedece à equação $\lambda_L^2 \nabla^2 B(x) = B(x)$, onde λ_L é o comprimento de penetração de London e $x = 0$ corresponde ao centro da placa.

a) Mostre que a indução magnética $B(x)$ dentro da placa é dada por:

$$B(x) = \frac{\cosh(x/\lambda_L)}{\cosh(\delta/2\lambda_L)}\, B_a\,.$$

b) Sabendo que dentro da placa a magnetização efetiva obedece à equação $4\pi M(x) = B(x) - B_a$, mostre que quando a espessura da placa é muito menor que o comprimento de penetração de London, isto é quando $\delta \ll \lambda_L$, ela é dada por $4\pi M(x) = -(\delta^2 - 4x^2)\frac{B_a}{8\lambda_L^2}$.

7 - Considere o mesmo filme de material supercondutor e a mesma indução magnética B_a que no problema 6.

a) Mostre que quando $\delta \ll \lambda_L$ e ignorando uma pequena contribuição da energia cinética, a energia livre no zero absoluto, $T = 0\,\mathrm{K}$, é dentro da placa dada por $F_s(B_a) = F_s(0) + (\delta^2 - 4x^2)\frac{B_a^2}{64\pi\lambda_L^2}$.

b) Mostre que quando $\delta \ll \lambda_L$ o valor médio através da espessura δ do filme da contribuição magnética $F_s(B_a) - F_s(0)$ para a energia livre $F_s(B_a)$ é dada por $\left(\frac{\delta}{\lambda_L}\right)^2 \frac{B_a^2}{96\pi}$.

c) Seja $H_c = B_{ac}$ (e $H_c = B_{ac}/\mu_0$ no sistema de unidades SI) o campo magnético crítico no interior de um cristal sem espessura fina mas do mesmo material supercondutor que o presente filme fino. Como são do mesmo material, considera-se que a contribuição não magnética $F_s(0)$ para a energia livre $F_s(B_a)$ é a mesma para o cristal e para o filme fino. Mostre que o campo magnético crítico do filme fino é proporcional a $\left(\frac{\lambda_L}{\delta}\right) H_c$.

Nota: nos problemas 6 e 7 usou-se o sistema de unidades CGS. Para se obter os mesmos resultados no sistema de unidades SI, substituir 4π por μ_0, excepto no caso da relação entre o campo magnético H e a indução magnética B, que de $H = B$, se passa para $H = B/\mu_0$.

Dados auxiliares

A densidade de estados de eletrões livres de massa m derivada na Série 3:

$$\mathcal{D}(\varepsilon) = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \varepsilon^{1/2}$$

$$\begin{aligned}
\int_0^\infty dx\, x^{\frac{1}{2}}\, e^{-x} &= \int_0^\infty dx\, \sqrt{x}\, e^{-x} = \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \\
\cos x &\approx 1 - \frac{1}{2}\, x^2 + ... \ \text{ para } \ x \ll 1 \\
\frac{1}{1+x} &\approx 1 - x + ... \ \text{ para } \ x \ll 1 \\
\cosh x &\approx 1 + \frac{1}{2}\, x^2 + ... \ \text{ para } \ x \ll 1 \\
\frac{d}{dx} \cosh x &= \sinh x \ \text{ e } \ \frac{d}{dx} \sinh x = \cosh x
\end{aligned}$$