# Estrutura de Bandas e Propriedades Electrónicas

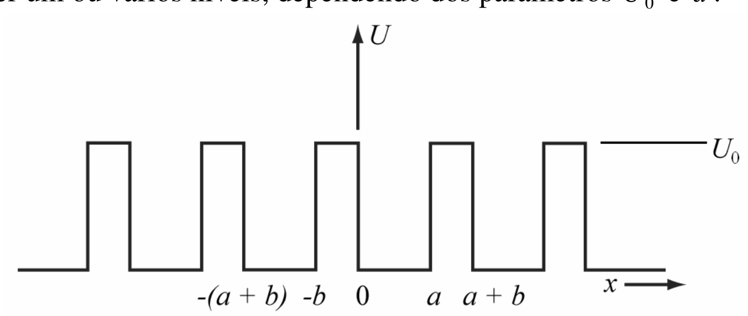
1) Calcule o número de átomos por $cm^3$ num cristal de silício, sabendo que a constante da rede é $0{,}543\text{nm}$. Calcule também o volume da primeira zona de Brillouin.

2) Considere o movimento unidimensional de um electrão cuja energia potencial em função da coordenada $x$ é dada por
$$U(x) = -V_0\delta(x),$$
onde $V_0 > 0$ é uma constante. Resolva a equação de Schrödinger e obtenha o nível de energia para o (único) estado confinado. R: $E = -\dfrac{mV_0^2}{2\hbar^2}$.

3) No exercício anterior foi considerado um "átomo unidimensional" de energia potencial aproximada pela função de Dirac. Obtenha os níveis de energia para os estados confinados de um electrão num sistema constituído por dois poços de potencial, iguais e separados por uma distância $a$, ou seja, com a energia potencial dada por:
$$U(x) = -V_0\left(\delta(x-\frac{a}{2}) + \delta(x+\frac{a}{2})\right).$$
Analise o resultado considerando os limites $a \to 0$ e $a \to \infty$.
R: $E = -\dfrac{mV_0^2}{2\hbar^2}\left(1 \pm 2e^{-mV_0 a/\hbar^2}\right)$

4) Calcule o espectro electrónico de um "cristal unidimensional" constituído por uma cadeia periódica de "átomos" idênticos aos considerados nos exercícios anteriores. Admita que um electrão fica sujeito ao potencial periódico,
$$U(x) = -V_0\sum_{n=-N/2}^{n=N/2}\delta(x - a\cdot n).$$
Use o teorema de Bloch e obtenha a função $E(k)$. Qual é a largura da banda de energia permitida para este "cristal"? R: $E(k) = -\dfrac{mV_0^2}{2\hbar^2}\left(1 - 4\cos(ka)e^{-mV_0 a/\hbar^2}\right)$.

5) Considere o modelo de Kronig-Penney para um cristal unidimensional, conforme se mostra na figura em baixo. Neste modelo os átomos são representados por poços rectangulares de energia potencial (de largura $a$), separados por barreiras de altura finita ($U_0$) e largura $b$. Um "átomo" isolado pode ter um ou vários níveis, dependendo dos parâmetros $U_0$ e $a$.



a) Resolva a equação de Schrödinger para uma célula unitária deste potencial periódico.
b) Utilize o teorema de Bloch para relacionar os valores da função de onda para duas células unitárias vizinhas, Mostre que o espectro de energia $E(k)$ é implicitamente determinado pela seguinte equação:

$$\left[\left(Q^2 - K^2\right)/2QK\right]\sinh Qb \sin Ka + \cosh Qb \cos Ka = \cos k(a+b)$$

onde $Q^2 = 2m(U_0 - E)/\hbar^2$, $K^2 = 2mE/\hbar^2$ e $k$ é o vector de onda de Bloch que serve de número quântico para este problema.
c) Analise esta solução para $Q >> K, Qb << 1$ e mostre a existência de bandas de valores interditos da energia.

6) Na aproximação da ligação forte, o espectro de energia do electrão numa rede de Bravais é dado por:

$$E(\vec{k}) = \varepsilon + \sum_m e^{i\vec{k}\vec{R}_m} A(\vec{R}_m)\left[\sum_m e^{i\vec{k}\vec{R}_m} S(\vec{R}_m)\right]^{-1}$$

em que $\varepsilon$ é o nível atómico, o índice $m$ percorre todos os sítios da rede, $\vec{R}_m$ designa os vectores de translação (sendo $\vec{R}_0 = 0$), $A(\vec{R}_m)$ e $S(\vec{R}_m)$ são os integrais de sobreposição. Considere uma rede cúbica simples, admita que

$$S(\vec{R}_m) = \begin{cases} 1 & \text{para} \quad \vec{R}_m = 0 \\ S_1 & \text{para} \quad \vec{R}_m = \vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3 \\ 0 & \text{em outros casos} \end{cases} ; \quad A(\vec{R}_m) = \begin{cases} A_0 & \text{para} \quad \vec{R}_m = 0 \\ A_1 & \text{para} \quad \vec{R}_m = \vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3 \\ 0 & \text{em outros casos} \end{cases}$$

e calcule o espectro $E(\vec{k})$. Trace um gráfico qualitativo para $\vec{k} \parallel (001)$ e $\vec{k} \parallel (111)$. Qual é a largura máxima da banda?

7) Num cristal hipotético que tem estrutura cúbica simples o espectro do electrão na banda de condução, na aproximação de ligação forte, é:

$$E(\vec{k}) = E_0 - t \cdot (\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a)$$

onde $E_0$ e $t$ são constantes.

a) Mostre que o espectro $E(\vec{k})$ é isotrópico no limite $\vec{k} \to 0$. Calcule a massa efectiva, $m^{*-1} = \left(m_{xx}^{-1} + m_{yy}^{-1} + m_{zz}^{-1}\right)/3$, no fundo da banda.

b) Calcule $m^*$ para $\vec{k} \parallel (001)$ em função de $|\vec{k}|$, e faça um gráfico qualitativo.

c) Analise as superfícies de energia constante em função da energia dentro da banda. Faça um desenho da secção destas superfícies no plano $k_z = 0$.

8) Considere um electrão num cristal bidimensional, cuja energia em função do quase-momento é dada por:

$$E(\vec{p}) = E_0 + (p_x^2 + p_y^2)/(2m^*).$$

Calcule a densidade de estados electrónicos em função da energia e trace um gráfico qualitativo.

9) No modelo de electrões livres, a $T = 0$:
a) Obtenha a relação entre a energia de Fermi e a concentração de electrões ( $n$ ) usando a densidade de estados, $g(E) = \frac{2^{1/2} m_0^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E}$, $(E > 0)$ . R: $E_F = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left(3\pi^2 n\right)^{2/3}$.
b) Mostre que a energia cinética por partícula é igual a $E_c = (3/5) E_F$.

10) Calcule as seguintes grandezas termodinâmicas do gás de electrões livres, a $T \to 0$:
a) Mostre que o potencial químico do gás, $\mu = (\partial F/\partial N)\big|_{T,V}$ em que $F$ é a energia livre e $N = nV$ ($n$ é a concentração e $V$ é o volume do gás), coincide com a energia de Fermi. <u>Nota</u>: A $T = 0$, a energia livre coincide com a energia total do gás e pode ser escrita como $F = NE_c$. Utilize o resultado do exercício anterior.
b) Mostre que a relação entre a pressão, $P$, e o volume do gás, a $T = 0$, é: $PV = 2NE_F/5$. <u>Nota</u>: A pressão pode ser calculada a partir da energia livre, $P = -(\partial F/\partial V)\big|_{T,N}$. Utilize o resultado do exercício anterior.
c) Mostre que o módulo de compressão. $K = -V(\partial P/\partial V)\big|_{T,N}$, a $T = 0$, é: $K = 5P/3$.
d) Calcule o valor numérico da contribuição dos electrões livres para o módulo de compressão do lítio usando $n = 4.7 \cdot 10^{22}\ \mathrm{cm}^{-3}$. Compare o resultado com o valor experimental, $K = (C_{11} + 2C_{12})/3$ com $C_{11} = 0.135 \cdot 10^{11}\ \mathrm{N \cdot m^{-2}}$ e $C_{12} = 0.114 \cdot 10^{11}\ \mathrm{N \cdot m^{-2}}$.

11) Deduza a fórmula de Drude para a condutividade eléctrica (d.c.) considerando o movimento dos electrões num semicondutor num campo eléctrico aplicado, levando em conta a resistência ao seu movimento oferecida pela rede cristalina imperfeita. Admita que a força de resistência pode ser aproximada por $F_A = m^* v/\tau$ em que $v$ é a velocidade instantânea do electrão, $m^*$ é a sua massa efectiva e $\tau$ é um tempo característico (tempo de relaxação).

12) Para um filme fino de sódio, de largura 5 mm e espessura 1 mm, que está num campo magnético de 0.1 T, perpendicular à superfície, calcule a d.d.p. de Hall quando o filme é percorrido por uma corrente eléctrica de 100 mA.

13) Obtenha a expressão para a mobilidade dos electrões num semicondutor homogéneo, sujeito a uma d.d.p. variável, $\Delta\varphi = \Delta\varphi_0 \exp(i\omega t)$, em função da frequência. R: $\mu = \frac{e}{m^*} \left\langle \tau / \left(1 + \omega^2 \tau^2\right) \right\rangle$.

14) Deduza a expressão

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega^2}{\omega_p^2}$$

para a permitividade eléctrica de um metal no modelo de Drude (onde $\omega_p^2 = 4\pi k_C ne^2/m^*$ é a frequência de plasma, $k_C$ é a constante de proporcionalidade na lei de Coulomb).

15) Utilizando o resultado do exercício anterior,
a) Mostre que os metais são totalmente não transparentes para as ondas electromagnéticas das frequências $\omega < \omega_p$.
b) Calcule o comprimento de onda limiar de transparência para o sódio se o volume da célula unitária primitiva é $35 \cdot 10^{-30}\,\mathrm{m}^3$.

16) No caso de difusão dos electrões de condução por iões da impureza, o tempo de relaxação depende da velocidade térmica do electrão como $\tau \propto v^3$. Como a mobilidade dos electrões, $\mu = e\langle\tau\rangle/m^*$, varia:
a) em função da concentração dos electrões num metal?
b) em função da temperatura num semicondutor onde o gás de electrões livres é não degenerado? R: $\mu = AT^{3/2}$, onde $A$ é uma constante.

17) Calcule a resistividade do: a) germânio e b) silício, intrínsecos a $T = 300\mathrm{K}$. Admita os seguintes valores para as massas efectivas da densidade de estados, $m_c^*$ e $m_v^*$, a mobilidade dos electrões, $\mu_n$, e a das lacunas, $\mu_p = \mu_n/b$:
a) Ge: $m_c^* = 0{,}55m_0$, $m_v^* = 0{,}34m_0$, $\mu_n = 3{,}8 \cdot 10^3\,\mathrm{cm}^2/(\mathrm{V}\cdot\mathrm{s})$, $b = 2{,}1$;
b) Si: $m_c^* = 1{,}08m_0$, $m_v^* = 0{,}59m_0$, $\mu_n = 1{,}45 \cdot 10^3\,\mathrm{cm}^2/(\mathrm{V}\cdot\mathrm{s})$, $b = 2{,}9$.

18) Mostre que a condutividade em função da concentração dos electrões na banda de condução, $n$, é mínima para um semicondutor em que $n = n_i\sqrt{\mu_p/\mu_n}$, onde $\mu_n$ e $\mu_p$ são as mobilidades de electrões e de lacunas, respectivamente, e $n_i$ é a concentração intrínseca de portadores de carga.

19) Admitindo que a constante dieléctrica para o silício cristalino é $\varepsilon_0 = 12$ e a massa efectiva dos electrões na banda de condução é $m^* = 0{,}34m_0$, calcule a energia de ionização de um dador hidrogenóide. Expresse esta energia em electron-volts e compare com a energia de hiato do silício.

20) Calcule a constante de Hall para uma amostra de InSb dopada com impurezas aceitadoras na concentração $N_a = 5 \cdot 10^{16}\,\mathrm{cm}^{-3}$, se a razão de mobilidades dos electrões e das lacunas for $b = \mu_n/\mu_p = 80$ e o factor de Hall for $r_H = 1{,}18$. Considere o campo magnético fraco, os átomos da impureza totalmente ionizados, $T = 300\,\mathrm{K}$ e $n_i = 1{,}38 \cdot 10^{15}\,\mathrm{cm}^{-3}$.