UNIVERSIDAD NACIONAL DE MAR DEL PLATA - 2017

FACULTAD DE INGENIERÍA - DEPARTAMENTO DE FÍSICA

CÁTEDRA: Física de los Semiconductores

SERIE 2: *Función Densidad de Estados - Bandas de Energía*

1.- Para los valores permitidos de la energía y del vector de onda k en un pozo de potencial unidimensional de profundidad infinita y ancho L:

a) ¿Qué longitud del espacio k ocupa cada estado?

b) Encontrar la densidad de estados $g(E) = (L^{-1})\dfrac{dN}{dE}$

c) Repetir los enunciados (a) y (b) para las cajas de potencial bidimensional y tridimensional, con lados de longitudes "a", "b", y "a", "b", "c" respectivamente.

2.- Calcular el número de estados disponibles en una pieza de cobre de $1cm^3$ para energías entre 0 y 6eV por encima del fondo del pozo de potencial. ¿Son suficientes estos estados para poder acomodar todos los electrones de valencia de un cristal de cobre de $1cm^3$?
Datos de la tabla periódica:
Valencia=1, es decir el cobre tiene un solo electrón de valencia por átomo.
Número de Avogadro=6.02 $x10^{23}$
Masa=63.55 gr/mol
Densidad=8.96 g/cm^3
Volumen atómico=7.1 cm^3/mol

3.- Para un trozo de cobre en forma de un delgado alambre de 1 m x 4.2 $\mathring{A}$ x 4.2 $\mathring{A}$, obtener el número de estados con energía 0 < E < 10eV.

4.- Demostrar el *teorema de Bloch*. Este teorema establece que si $\Psi_k(x) = e^{ikx}u_k(x)$ es la función de onda de un electrón en una red periódica con espaciamiento *a*, entonces la $u(x)$ debe ser una función periódica con período igual al espaciamiento de la red, es decir $u_k(x)=u_k(x+a)$.

5- Encontrar la relación de dispersión de un modelo de Kronig-Penney infinito consistente en un tren de deltas de Dirac de peso P, espaciadas una distancia L entre sí.

6.- Graficar el segundo miembro (función de α·L) de la relación de dispersión del modelo de Kronig-Penney del problema anterior, para tres valores de R: R=0, R=2, R=10. Estimar gráficamente los anchos (en α·L) de la banda permitida y prohibida en cada caso y discutir los resultados.

7.- Para la función hallada en problema anterior con R=10, evaluar los valores de energía en los bordes superior e inferior de la primera banda prohibida, en k = π/a. El período espacial de la red es de 1Å. Hallar el ancho de la segunda banda permitida, y compararlo con el ancho de la primera banda permitida. Sugerencia: usar el método de aproximación de Taylor cuando hiciera falta.

8.- Demostrar que en el modelo de Kronig-Penney, la $dE(k)/dk$ se anula en los bordes de una banda permitida. ¿Cuáles son los valores del vector de onda cristalino en cada discontinuidad de la energía?

9.- Para el modelo de Kronig-Penney de longitud finita:

a) Hallar los valores permitidos del vector de onda k, dentro de cada banda. ¿Cómo encontraría los valores permitidos de la energía?

b) Hallar la función densidad de estados g(E), en forma exacta.

c) Hallar la función densidad de estados g(E), en forma aproximada, en el borde inferior de la primer banda permitida. Esto se hace suponiendo $E \cong E_{MIN} + \hbar^2 k^2 / 2m^*$, donde m* es una constante con unidades de masa.

d) ¿Qué nuevo fenómeno surge al generalizar este modelo a tres dimensiones?

Ctes. Fundamentales:

Masa del electrón $m_e = 9.11 \times 10^{-31}$ Kg.

Masa del Protón $m_p = 1.67 \times 10^{-27}$ Kg.

Velocidad de la luz $c = 2.99 \times 10^{8}$ m/s

Cte de Planck $h = 6.62 \times 10^{-34}$ J.s

Carga del electrón $e = 1.60 \times 10^{-19}$ C

Cte de Boltzmann $k = 1.38 \times 10^{-23}$ J/K

RESPUESTAS DE LA SERIE 2

1) a) Δk=π/L, b) $g(E) = \frac{2\cdot(2m)^{1/2}}{h\cdot\sqrt{E}} = \frac{(2m)^{1/2}}{\pi\cdot\hbar\cdot\sqrt{E}}$,

c) Caja de potencial bidimensional: Δkx ·Δky =π^2/(ab) $g(E) = \frac{4\cdot\pi\cdot m}{h^2} = \frac{m}{\pi\cdot\hbar^2}$,

Caja de potencial tridimensional: Δkx ·Δky ·Δkz =π^3/(abc)

$$g(E) = \frac{4\cdot\pi\cdot(2m)^{3/2}\sqrt{E}}{h^3} = \frac{(2m)^{3/2}\sqrt{E}}{2\cdot\pi^2\cdot\hbar^3}$$

2) Existen N=6.7 $\cdot 10^{22}$ estados entre E=0 y E=6eV. Hay 8.49 $\cdot 10^{22}$ electrones de valencia en 1cm^3 de cobre

3) Si lo resolviera del mismo modo que en el ejercicio anterior obtendría N=2.54 $\cdot 10^{10}$ electrones. Sin embargo, cometería un apreciable error, ya que en este caso hay una baja densidad de estados en dos de los tres ejes del espacio k. Para resolver en modo más exacto, primero encuentre qué valores de k en dichos dos ejes cumplen con E<10eV. A partir de este resultado, encuentre el modo de hallar el número de estados, sabiendo que en el tercer eje del espacio k la densidad de estados es alta. Encontrará que N=7.8 $\cdot 10^9$ electrones cumplen con E<10eV. Este es el resultado exacto.

4) En bibliografía puede encontrarse la demostración matemáticamente ortodoxa del teorema de Bloch. Sin embargo, para nosotros bastaría una solución aplicada específicamente a las funciones de onda.
Sugerencia: la probabilidad de hallar a la partícula en puntos congruentes de pozos vecinos es la misma. Es decir:

$$|\Phi(x)|^2 = |\Phi(x+a)|^2$$
$$\Rightarrow |\Phi(x)| = |\Phi(x+a)|$$

Es decir que el cociente de las funciones de onda entre dos puntos congruentes contiguos debería ser, por simetría, independiente de los pozos elegidos, e igual a un número complejo de módulo igual a 1, que escribiremos $1\cdot e^{ika}$, siendo k un parámetro ajustable.

$$\frac{\Phi(x+a)}{\Phi(x)} = 1\cdot e^{ika}$$

Ahora, suponiendo que se cumple la fórmula de Bloch, demuestre que la variable u(x) es periódica con período "a". De esta forma la demostración queda completa.

5) El resultado es:

$$\cos(k \cdot L) = \cos(\alpha \cdot L) + R \cdot \frac{\sin(\alpha \cdot L)}{(\alpha \cdot L)}$$

$$R = \frac{mPL}{\hbar^2}$$

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

Sugerencia: plantee la solución de Schrödinger independiente del tiempo en el intervalo $0^+ < x < L^-$, con la única diferencia que ahora sea función de $\alpha=(2mE)^{1/2}/\hbar$. Luego, usando el teorema de Bloch, halle u(x) en dicha zona. Por medio de la periodicidad de u(x), sabemos que $u(0^-)=u(L^-)$. Usando la condición de contorno en x=0 para Φ(x) debe llegar a:

$$\left[e^{i(\alpha-k)L} - 1\right] \cdot A + \left[e^{-i(\alpha+k)L} - 1\right] \cdot B = 0$$

Ahora, sabiendo que $u(0^-)=u(L^-)$ y $u'(0^-)=u'(L^-)$, se puede plantear la condición de contorno para la derivada, de la cual surge:

$$\left[i\alpha - i\alpha \cdot e^{i(\alpha-k)L} - \frac{2mP}{\hbar^2}\right] \cdot A + \left[-i\alpha + i\alpha \cdot e^{-i(\alpha+k)L} - \frac{2mP}{\hbar^2}\right] \cdot B = 0$$

6) Para R=0, no hay bandas prohibidas. Para R=2, banda prohibida en el intervalo (0<α·L<1.7), banda permitida en el intervalo (1.7<α·L<π), banda prohibida en el intervalo (π <α·L<4.1), banda permitida en el intervalo (4.1<α·L<2π), etc. Para R=10, banda prohibida en el intervalo (0<α·L<2.6), banda permitida en el intervalo (2.6<α·L<π), banda prohibida en el intervalo (π <α·L<4.8), banda permitida en el intervalo (4.8<α·L<2π), etc. Todos valores aproximados. Se observa cómo las bandas prohibidas se hacen más pequeñas y las permitidas más grandes a medida que incrementamos (α·L). Y cómo las bandas prohibidas se hacen más grandes y las permitidas más pequeñas a medida que incrementamos R.

7) Utilizando una aproximación de Taylor de segundo grado en (α·a)=3π/2, da (α·a)=5.275 en el borde superior de la primer banda prohibida. El resultado es entonces 38eV<E<106eV para la primer banda prohibida. Para la segunda banda permitida, 106eV<E<150eV. Utilizando una aproximación de Taylor de segundo grado en (α·a)=π, da (α·a)=2.635 en el borde inferior de la primer banda permitida. Entonces, para dicha banda, 26eV<E<38eV.

8) Sugerencia: derive en forma implícita la relación de dispersión.
Los valores de k en las discontinuidades de la función E(k) es k=n π / a, con "n" entero.

9) a) Debe realizar una deducción y llegar a k=n π / L, donde L es la longitud total del material.
b) La densidad de estados queda de la siguiente manera:

$$g(E)=\frac{2\cdot m}{\pi\cdot\hbar\cdot\left(\sqrt{2mE}\right)}\left\{\frac{\sin\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\cdot a\right)-R\cdot\left[\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\cdot a\right)\cdot\cos\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\cdot a\right)-\frac{\sin\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\cdot a\right)}{\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\cdot a\right)^{2}}\right]}{\sin\left\{\cos^{-1}\left[\cos\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\cdot a\right)+R\cdot\frac{\sin\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\cdot a\right)}{\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\cdot a\right)}\right]\right\}}\right\}$$

c) La función g(E) del inciso anterior puede simplificarse en las inmediaciones de los bordes de las bandas permitidas. En este caso:

$$g(E)\cong\frac{2\cdot\left(2m^{*}\right)^{1/2}}{h\cdot\sqrt{E-E_{MIN}}}=\frac{\left(2m^{*}\right)^{1/2}}{\pi\cdot\hbar\cdot\sqrt{E-E_{MIN}}}$$

Observe que esta ecuación posee forma similar al resultado del inciso (1a), si bien otro modelo totalmente distinto fue usado para deducirla.

d) El nuevo fenómeno que surge hace posible la conducción eléctrica en los metales bivalentes.