FÍSICA DA MATÉRIA CONDENSADA I

Recorrência

28 de Fevereiro de 1997

1. Considere um feixe de neutrões, paralelo e monocromático, difundido elasticamente por um cristal cúbico simples. O feixe incidente (monocromático) entra no cristal na direcção [110] e a direcção [001] é vertical e aponta para cima. A constante da rede é $a = 3.0\mathring{A}$. O feixe é reflectido pelo plano (111). Desenhe a secção plana correspondente da rede recíproca e marque os vectores de onda dos feixes incidente e difractado. Calcule:

   (a) a energia em eV dos neutrões incidentes e

   (b) a direcção do feixe difractado.

2. Considere deslocamentos longitudinais de uma rede monoatómica linear, com N átomos de massa M, à distância a. Há interacções entre primeiros e segundos vizinhos, e estas interacções são harmónicas com constantes de força $C_1 = C$ e $C_2 = C/2$, respectivamente. Calcule a relação de dispersão $\omega(k)$ e mostre que a frequência máxima dos fonões ocorre para $k = 2\pi/3a$ e toma o valor,

$$\omega = \left(\frac{9C}{2M}\right)^{1/2} \tag{4}$$

   Calcule a densidade de estados no espaço dos k, $D(k)$, e esboce a forma correspondente de $D(\omega)$.

3. Considere um cristal unidimensional com constante a no qual a energia de um electrão é dada por

$$E(k) = \frac{\hbar^2}{ma^2}\left(\frac{7}{8} - \cos ka + \frac{1}{8}\cos 2ka\right) \tag{5}$$

   (a) Esboce a relação de dispersão da energia.

   (b) Determine a massa efectiva electrónica no topo e no fundo da banda.

   (c) Esboce a densidade de estados electrónicos.

4. Escreva a expressão da condutividade térmica e indique o significado dos símbolos para metais e isolantes. Discuta a variação da condutividade térmica, a baixas temperaturas, com a concentração de um isótopo do mesmo elemento, para metais e isolantes.

5. No silício cristalino a energia do hiato é $E_g = 1.14eV$, a massa efectiva das lacunas, $m_p = 0.3m$ e a massa efectiva dos electrões, $m_n = 0.2m$.

   (a) Fazendo (e justificando) aproximações adequadas encontre a expressão para a função $f(T)$ que aparece na lei de acção da massa:

$$np = f(T) \tag{6}$$

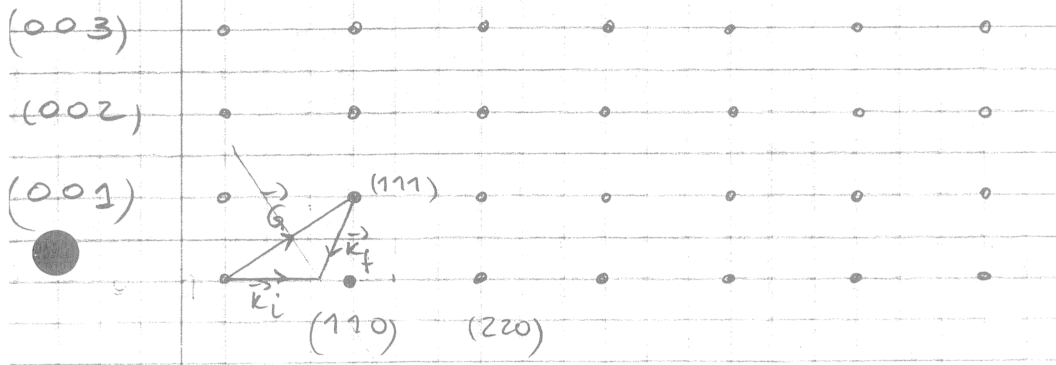
onde n e p são as concentrações de electrões e lacunas e T é a temperatura.

(b) Qual é a concentração de impurezas dadoras que deve ser utilizada, para que a condutividade extrínseca seja quatro ordens de grandeza superior à condutividade intrínseca, à temperatura ambiente? (Tome a constante dieléctrica no silício, $\epsilon = 11.8$).

Recorrência.

1. O ângulo entre as direcções [110] e [001] é 90° pois o produto interno é zero.

Plano da difracção é o plano definido pelas direcções (110) e (111)



secção de rede recíproca

a) $2\,\vec{G}\cdot\vec{k} = G^2$ $\qquad \vec{G} = \frac{2\pi}{a}(\hat{x}+\hat{y}+\hat{z})$

$G = \frac{2\pi}{a}\sqrt{3}$ $\qquad G^2 = \frac{4\pi^2}{a^2}\times 3$

$\vec{k}_i = k_x\hat{x} + k_y\hat{y}$ - with $k_x = k_y = k_0$

$\vec{k}_i = k_0(\hat{x}+\hat{y})$ $\qquad |\vec{k}_i| = \sqrt{2}\,k_0$

$$2\,\vec{G}\cdot\vec{k} = 2\times\frac{2\pi}{a}\times(k_0+k_0) = \frac{8\pi}{a}k_0 = \frac{4\pi^2}{a^2}\times 3$$

donde, $k_0 = \frac{3\pi}{2a}$ e $|\vec{k}_i| = \frac{3\pi}{\sqrt{2}\,a}$

O comprimento de onda é

$\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{2\sqrt{2}\,a}{3}$ e $E^{1/2}_{(eV)} = \frac{0.28}{\lambda\,(Å)}$

$$E\,(eV) = \left(\frac{0.28\times 3}{2\sqrt{2}\,a_{(Å)}}\right)^2$$

b) Direcção de $\vec{k}'$

$\vec{k}' = \frac{\pi}{2a}(3\hat{x}+3\hat{y})$ $\qquad \vec{G} = \frac{\pi}{2a}(4\hat{x}+4\hat{y}+4\hat{z})$

$$\vec{G} = \vec{k}' - \vec{k}$$

$$\vec{k}' = \vec{G}_{111} + \vec{k}_{110}$$

$$= \frac{\pi}{2a}\left(7\hat{x} + 7\hat{y} + 4\hat{z}\right)$$

- Mas posso tomar $\vec{G} = \frac{\pi}{2a}\left(-4\hat{x} - 4\hat{y} - 4\hat{z}\right)$

Então fica

$$\vec{k}' = \frac{\pi}{2a}\left(-\hat{x} - \hat{y} - 4\hat{z}\right)$$

Ou seja

$$\hat{k}' = (7\,7\,4) \quad \text{ou} \quad (\bar{1}\,\bar{1}\,\bar{4})$$

2. $$\omega^2 = \frac{2}{M}\left[C(1-\cos ka) + \frac{C}{2}(1-\cos 2ka)\right]$$

$$= \frac{2C}{M}\left[\frac{3}{2} - \cos ka - \frac{1}{2}\cos 2ka\right]$$

Máximo de ω $(\omega \neq 0)$

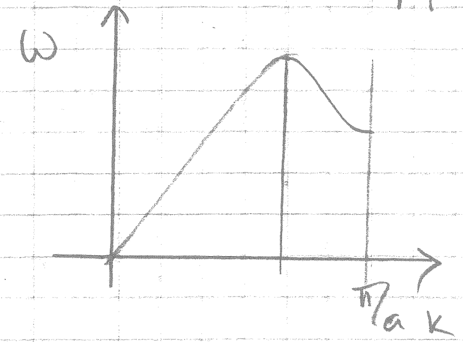
$$2\omega \frac{d\omega}{dk} = \frac{2Ca}{M}\left(\sin ka + \sin 2ka\right) = 0 .$$

ie $$\sin\frac{3ka}{2}\cos\frac{ka}{2} = 0$$

ou $\frac{ka}{2} = \pi/2$ (min) ou $\frac{3ka}{2} = \pi$ (max.)

Máximo ocorre para $k = \frac{2\pi}{3a}$.

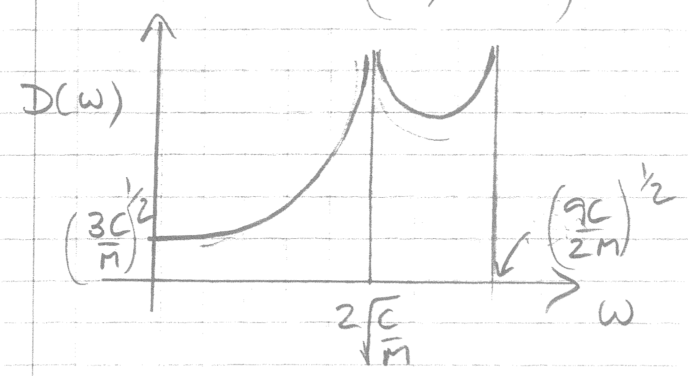
$$\omega^2_{max} = \frac{2C}{M}\left(\frac{3}{2} + \frac{1}{2} + \frac{1}{4}\right) = \frac{9C}{2M}.$$



Nº de modos em $\Delta k = \frac{L\,\Delta k}{2\pi}$

Densidade $\frac{L}{2\pi} = \frac{Na}{2\pi}$

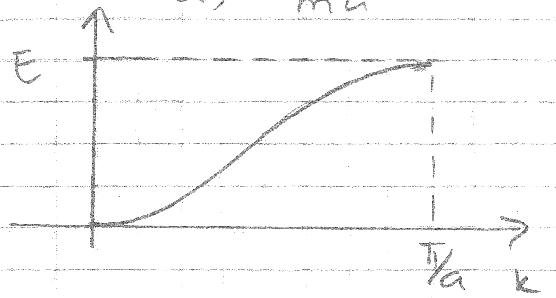
$$D(\omega) = \frac{L}{\pi}\cdot\frac{1}{(|d\omega/dk|)}$$



$k \sim 0$ $$\omega^2 \simeq \frac{2C}{M}\left[\frac{(ka)^2}{2} + 4\frac{(ka)^2}{4}\right]$$

3. a) $E(k)=0$, $k=0$

$E\left(k=\frac{\pi}{a}\right)=\frac{2\hbar^2}{ma^2}$



b) $k \sim 0$ $\quad E(k) \simeq \frac{1}{4}\frac{\hbar^2 k^2}{m}$

$\therefore\ m^* = 2m_e$ no fundo da banda

$k \sim \pi/a$ $\quad k = k' + \pi/a$ c/ k' pequeno.

$$E(k) \simeq \frac{\hbar^2}{ma^2}\left(2 - \frac{3}{4}k'^2a^2\right)$$

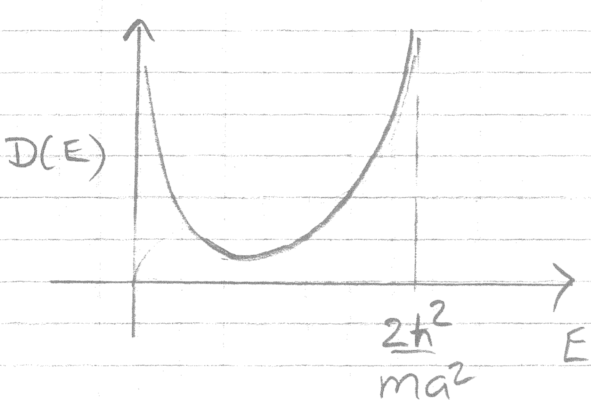
$\therefore\ m^* = -\frac{2}{3}m_e$, massa efectiva de lacunas

c) $k \sim 0$ $\quad E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$ $\qquad k \sim \frac{\pi}{a}$ $\quad E(k) = \frac{2\hbar^2}{ma^2} - \frac{3\hbar^2}{4m}k'^2$

$E(k) - E_0 = -\frac{3}{4}\frac{\hbar^2}{m}k'^2$

$\therefore\ D(E)\,dE = \frac{V\ [illegible]}{h^3}$

Para $k = \pi/a$, $\frac{dE}{dk} = 0$, e $D(E) \to \infty$.



4. Qual é a potência dissipada?

$$P_{diss}/V = \sigma E^2$$

e usando

$$\sigma = ne^2\tau/m$$

e $mv = eE\tau$

vem $\sigma E^2 = \dfrac{n^2e^2v^2}{\sigma}$

Para $v = v_s$, a potência dissipada é $\simeq 1{,}87\ W/mm^3$

Como a capacidade térmica de $1\ mm^3$ de metal é $\sim 0{,}4 \times 10^{-3}\ J/K$, esta densidade de potência produziria um aumento de temperatura de 1K em $\sim 2 \times 10^{-4}$ s!

Medidas com uma corrente pulsada resolveriam este problema

5. a) Bandas parabólicas.

$$D_c(E) = \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m_e}{\hbar^2}\right)^{3/2}(E-E_c)^{1/2}$$

$E - \mu \gg kT$

$$f(E) \sim e^{(\mu-E)/kT}$$

$$n = \int_{E_c}^{\infty} f(E)\, D_c(E)\, dE$$

$$\simeq \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m_e kT}{\hbar^2}\right)^{3/2} e^{-(E_c-\mu)/kT}\int_0^{\infty} x^{1/2}e^{-x}\,dx$$

$$\therefore \quad n \approx N_e\, e^{-(E_c-\mu)/kT} \qquad N_e = 2\left(\frac{m_e kT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}$$

$$D_v = \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m_h}{\hbar^2}\right)^{3/2}(E_v-E)^{1/2}$$

$$f_h(E) = 1 - f(E) \approx e^{-(\mu-E)/kT}$$

$$p = \int_{-\infty}^{E_v} f_h(E)\, D_v(E)\, dE$$

$$= N_h\, e^{-(\mu-E_v)/kT} \qquad N_h = 2\left(\frac{m_h kT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}$$

$$\therefore \quad f(T) = np \approx N_e N_h\, e^{-E_g/kT}$$

b) $np = f(T)$

Semi-condutor intrínseco

$n_i = n = p$

$$\sigma_i = e n_i(\mu_e + \mu_h) \approx 2 e n_i \mu_e$$

Nº de dadores ionizados

$n \sim N_d$

$\sigma = e\mu_e N_d \qquad$ qdo $\quad n \sim N_d \gg n_i$

$$\frac{\sigma}{\sigma_i} = \frac{N_d}{2n_i} = 10^4$$

fica $N_d = 2 \times 10^4 n_i$

Mas $n_i = \sqrt{f(T)}$

$$= 2\left(0{,}2 \times 0{,}3\right)^{0{,}75} \left(\frac{kT\, mc^2}{2\pi \hbar^2 c^2}\right)^{3/2} e^{-E_g/2kT}$$

$kT \sim \frac{1}{40}\, eV$ $\quad E_g \sim 1{,}14\, eV$ $\quad mc^2 \sim 0{,}511\, MeV$

$c \sim 3 \times 10^8\, m\, s^{-1}$

$\hbar \sim 6{,}58 \times 10^{-16}\, eV\, s$

e vem

$n_i \sim 3{,}62 \times 10^{14}\, m^{-3}$

$\therefore \quad N_d = 7{,}2 \times 10^{18}\, m^{-3}.$