



Pontificia Universidad Católica de Chile
Escuela de Ingeniería / Facultad de Física
IEE1133/FIZ1433 Materiales Eléctricos
Profesor: Roberto Rodríguez

Ayudantía 4: Estructura de bandas, densidad de estados.

Joaquín Arancibia: jiaranci@puc.cl
Fabián Cádiz: facadiz@puc.cl

La física de semiconductores constituye el origen de inventos que han tenido un impacto considerable en diversos dominios tales como la informática, las telecomunicaciones, la medicina, la industria automotriz, etc. En particular, ha llevado al descubrimiento en 1947 de una componente esencial, el **transistor**, sobre la cual se basa el desarrollo fantástico de la industria electrónica. Los primeros transistores estaban hechos de Germanio, pero rápidamente se descubrió que sus propiedades podían ser fuertemente optimizadas utilizando Silicio. Con este material, y gracias a las tecnologías que permiten reducir las dimensiones de las componentes individuales, actualmente se sabe por ejemplo fabricar circuitos integrados que contienen millones de transistores sobre una superficie de aprox. 200 mm^2 . El camino a la miniaturización continúa, pero existen límites físicos, tecnológicos y probablemente económicos que se deben tener en cuenta.

El silicio es el material principal en microelectrónica, pero otros semiconductores también son importantes a causa de sus diversas aplicaciones. Es el caso de los semiconductores compuestos por elementos III-V (de la tabla periódica), como el GaAs, $Al_xGa_{1-x}As$, InP y $In_xGa_{1-x}As$. En efecto, estos materiales son utilizados para construir láseres-semiconductores cuyo descubrimiento se remonta a 1962 y que son, por ejemplo, particularmente interesantes para las telecomunicaciones ópticas. Algunos semiconductores compuestos con elementos II-IV son también materiales importantes : $Hg_{1-x}Cd_xTe$ juega un rol esencial en el dominio de la detección infrarroja.

Desde el punto de vista de la investigación, ésta ha estado largo tiempo orientada al estudio de materiales masivos, pero hoy se interesa mucho más a estructuras semiconductoras a dos, una, y cero dimensiones. En efecto, estas estructuras permiten en ciertos casos mejorar el funcionamiento de dispositivos importantes y son también la base de efectos nuevos que podrían eventualmente permitir crear componentes originales. Las fuentes de luz utilizadas en telecomunicaciones ópticas o en las cabezas lectoras de discos compactos son láseres semiconductores que confinan en una dimensión a los electrones a través de un pozo cuántico, es decir, son estructuras bi-dimensionales.

La física de semiconductores es una excelente ilustración de la mecánica cuántica, de la física estadística y de la física de sólidos. Las propiedades electrónicas de los semiconductores son consecuencia de su estructura de bandas, es decir de la existencia de bandas de energía permitidas y prohibidas para los electrones.

1. Redes cristalinas

Un cristal está constituido por la repetición periódica de un motivo elemental. Más precisamente, si un punto en particular del motivo ocupa el punto de coordenadas \vec{r} , todos los puntos que tienen el mismo entorno geométrico que \vec{r} son dados por:

$$\vec{r}' = \vec{r} + m_1\vec{a}_1 + m_2\vec{a}_2 + m_3\vec{a}_3$$

donde los m_i ($i = 1, 2, 3$) son enteros, y los \vec{a}_i tres vectores no coplanares específicos del cristal considerado. Se dice que la base $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ constituye la **mall**a. La malla más pequeña es aquella de menor volumen posible, se llama malla primitiva o **mall**a elemental, y está engendrada por los vectores \vec{a}_i , también llamados períodos de la red de Bravais del cristal.

Los semiconductores formados de elementos de la columna IV de la tabla periódica (Si, Ge) y la mayoría de los semiconductores constituidos de un elemento de la columna III y un elemento de la columna V (GaAs, InP) cristalizan en el sistema cúbico a caras centradas de la figura 1

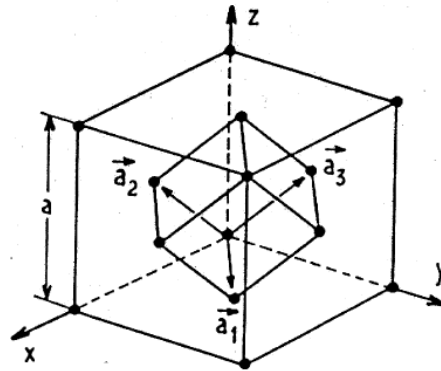


Figura 1: Red cúbica a caras centradas. El romboedro construido sobre los vectores $\vec{a}_1 = a/2(\hat{i} + \hat{j})$, $\vec{a}_2 = a/2(\hat{j} + \hat{k})$, $\vec{a}_3 = a/2(\hat{i} + \hat{k})$ es la malla elemental.

El motivo es, en el caso de los semiconductores, constituido por dos átomos, uno en la posición $(0, 0, 0)$, el otro a un cuarto de la diagonal principal del cubo (figura 2). La malla elemental contiene entonces 2 átomos.

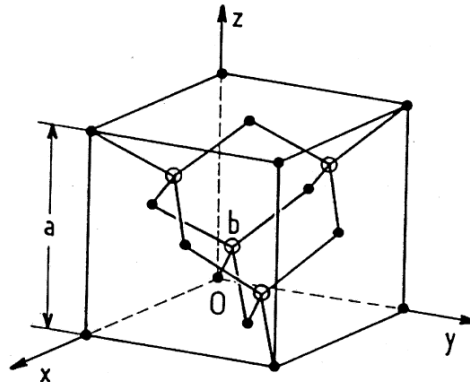


Figura 2: Estructura cristalina del silicio. El motivo está constituido de dos átomos, el átomo en el origen y el átomo b de coordenadas $a/4(1, 1, 1)$. La red de Bravais es cúbica a caras centradas. Cada átomo tiene 4 próximos vecinos.

2. Estados cuánticos del electrón en un sólido cristalino: estructura de bandas

Un sólido cristalino se constituye por la repetición triplemente periódica de un motivo elemental, que en el caso del silicio o del arsenio de galio, contiene dos átomos. Los átomos están situados en los nodos de una red regular periódica. Los núcleos y los electrones interactúan a través del potencial coulombiano y se tiene un número enorme de partículas de forma que determinar los estados electrónicos de un material cristalino es a priori un problema muy difícil.

3. Aproximación de electrones independientes

Si se considera un electrón libre de masa m_0 confinado en una caja paralelepípeda, los estados propios del hamiltoniano son ondas planas $\psi(\vec{r}) = Ae^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$, donde A es una constante. La energía asociada a la onda plana de vector de onda \vec{k} está dada por:

$$E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$$

En el caso de un sólido cristalino, es razonable suponer que los núcleos, situados en los nodos de una red periódica, están fijos ya que son muy pesados. Se puede en consecuencia despreciar su energía cinética respecto a la de los electrones. Se puede igualmente ignorar la repulsión coulombiana entre los núcleos, ya que es una constante. Los electrones están sometidos a la atracción coulombiana de los núcleos (cuyas posiciones están bien definidas) representada por un potencial V_{en} y a la repulsión coulombiana entre electrones, correspondiente a un potencial V_{ee} . El hamiltoniano de los N electrones del sólido está dado por:

$$H = T_e + V_{en} + V_{ee}$$

donde T_e es la energía cinética de los electrones. V_{en} tiene la forma de un potencial periódico creado por los núcleos y que actúa sobre los electrones. V_{ee} es un término electrón-electrón que vuelve el problema muy difícil. Se substituye este potencial de interacción por un potencial promedio, lo que permite considerar a los electrones como independientes. Se puede reemplazar así H por una suma de N hamiltonianos de electrones independientes, y se debe resolver el problema a un electrón correspondiente al hamiltoniano siguiente:

$$h = \frac{\vec{p}^2}{2m_0} + V(\vec{r})$$

donde $V(\vec{r})$ tiene en cuenta la atracción ejercida por los núcleos y el efecto de la repulsión media de los electrones. $V(\vec{r})$ tiene la misma periodicidad espacial que aquella de la red cristalina. El teorema de Bloch nos dice que los estados propios del hamiltoniano h tienen la forma:

$$\psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = u_{n,\vec{k}}(\vec{r})e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

donde $u_{n,\vec{k}}(\vec{r})$ tiene la periodicidad de la red cristalina. Las funciones $\psi_{n,\vec{k}}(\vec{r})$ son llamadas funciones de Bloch y un electrón independiente cuyo hamiltoniano es h es un electrón de Bloch. En consecuencia, si $T = m_1\vec{a}_1 + m_2\vec{a}_2 + m_3\vec{a}_3$, con m_i un entero:

$$\psi_{n,\vec{k}}(\vec{r} + \vec{T}) = \psi_{n,\vec{k}}(\vec{r})e^{i\vec{k}\cdot\vec{T}}$$

los puntos \vec{r} y $\vec{r} + \vec{T}$ tienen las mismas propiedades físicas, en efecto la densidad electrónica es periódica en el espacio:

$$|\psi_{n,\vec{k}}(\vec{r} + \vec{T})|^2 = |\psi_{n,\vec{k}}(\vec{r})|^2$$

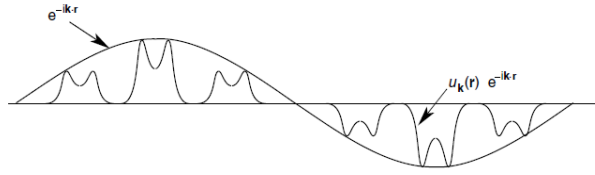


Figura 3: Las funciones de onda (funciones de Bloch) de un electrón en un sólido están completamente deslocalizadas en la estructura. Poseen una envolvente en forma de una onda plana.

La ecuación de autovalores para las funciones de Bloch es:

$$\left(\frac{\vec{p}^2}{2m_0} + V(\vec{r}) \right) \psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = E_{n,\vec{k}} \psi_{n,\vec{k}}(\vec{r})$$

El estado cuántico de un electrón está determinado entonces por 4 números cuánticos, es decir k_x, k_y, k_z y un entero n (llamado índice de banda) ya que la ecuación puede tener varias soluciones para \vec{k} fijo. En la medida que \vec{k} varía, ellas dan nacimiento a bandas de energía permitidas para los electrones. Escogemos como condiciones de borde las condiciones periódicas de Born-Von Karman:

$$\psi(\vec{r} + \vec{L}) = \psi(\vec{r})$$

Suponemos que \vec{L} es un vector de la red de Bravais, que contiene un número muy grande de períodos, $\vec{L} = N_1 \vec{a}_1 + N_2 \vec{a}_2 + N_3 \vec{a}_3$. Las condiciones de borde de Born-Von Karman imponen que los valores de \vec{k} están cuantificados:

$$\vec{k} \cdot N_i \vec{a}_i = 2\pi n_i, \quad n_i \in \mathbb{N}, \quad i = 1, 2, 3$$

Si definimos al espacio recíproco como aquella red formada por los vectores de base \vec{a}_i^* , que se definen a partir de \vec{a}_j según:

$$\vec{a}_i^* \cdot \vec{a}_j = 2\pi \delta_{ij}$$

entonces la condición de cuantificación para \vec{k} es:

$$\vec{k} = \frac{n_1}{N_1} \vec{a}_1^* + \frac{n_2}{N_2} \vec{a}_2^* + \frac{n_3}{N_3} \vec{a}_3^*$$

donde (n_1, n_2, n_3) son enteros relativos eventualmente nulos. Para un sólido macroscópico estos valores de \vec{k} están muy cercanos, dentro de una malla de la red recíproca, ya que $N_i \gg 1$. La red recíproca de una red cúbica a caras centradas de arista a es una red cúbica de cuerpo centrado de arista $4\pi/a$ (caso del Si, GaAs).

4. Primera zona de Brillouin

Consideremos la función de Bloch relativa a un vector de onda \vec{k} , tal que $\vec{k} = \vec{k}' + \vec{G}$, donde \vec{G} es un vector de la red recíproca, y mostremos que esta función de Bloch $\psi_{n,\vec{k}}(\vec{r})$ es también una función de Bloch para el vector de onda \vec{k}' :

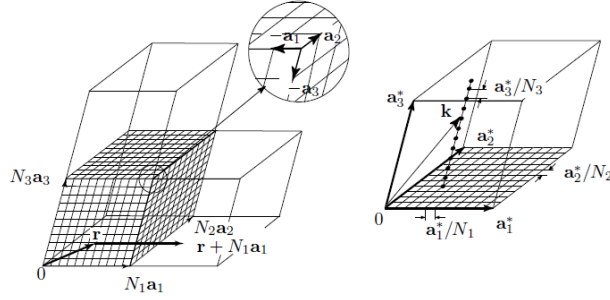


Figura 4: A la izquierda: se considera un bloque de cristal que contiene $N_1N_2N_3$ mallas elementales. A la derecha: la condición de borde para las funciones de Bloch cuantifica los valores posibles para \vec{k} , que se encuentran muy cercanos en la malla elemental de la red recíproca, ya que $N_i \gg 1$.

$$\psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = u_{n,\vec{k}}(\vec{r})e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = u_{n,\vec{k}}(\vec{r})e^{i\vec{k}'\cdot\vec{r}}e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}}$$

la función $u_{n,\vec{k}}(\vec{r})e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}}$ tiene la misma periodicidad de la red, en efecto:

$$u_{n,\vec{k}}(\vec{r} + \vec{T})e^{i\vec{G}\cdot(\vec{r} + \vec{T})} = u_{n,\vec{k}}(\vec{r})e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}}$$

En consecuencia, la función $u_{n,\vec{k}}(\vec{r})e^{i\vec{k}'\cdot\vec{r}}e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}}$, que puede ser re-escrita $u_{n,\vec{k}'}(\vec{r})e^{i\vec{k}'\cdot\vec{r}}$ al escribir $u_{n,\vec{k}}(\vec{r})e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}} = u_{n,\vec{k}'}(\vec{r})$, es solución de la ecuación de Schrodinger tanto para \vec{k} como para $\vec{k}' = \vec{k} - \vec{G}$. El espacio recíproco es entonces inútilmente demasiado grande para enumerar a las funciones de Bloch, ya que en él se encuentran todos los puntos \vec{k} y $\vec{k} - \vec{G}$ (\vec{G} arbitrario) para los cuales los estados cuánticos son idénticos. Se puede entonces reducir el dominio a los valores de \vec{k} que pertenecen a la primera zona de Brillouin, que se define como el volumen del espacio recíproco más cercano al origen $\vec{k} = \vec{0}$ que todo otro nodo de la red recíproca. Esta primera zona de Brillouin está delimitada por los planos mediadores de los vectores \vec{G} más cortos de la red recíproca. La primera zona de Brillouin para una red de Bravais cúbica a caras centradas (*Si*, *GaAs*) se representa en la figura siguiente:

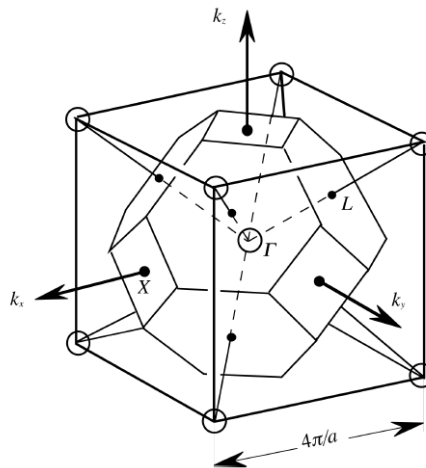


Figura 5: Primera zona de Brillouin en el caso de la red cúbica a cara centrada.

El espectro de energía está entonces compuesto de bandas permitidas que forman un cuasi-continuo ya que los valores accesibles para \vec{k} están muy próximos: $E_{n,\vec{k}}$ se trata como una

función continua $E_n(\vec{k})$ llamada relación de dispersión de la energía. Las bandas permitidas están separadas por bandas de energía prohibidas donde no existen estados posibles para los electrones: la ecuación de Schrodinger para esos valores de la energía no tiene soluciones de Bloch. Las bandas de energía permitidas se representan esquemáticamente por las curvas continuas que se muestran en la figura:

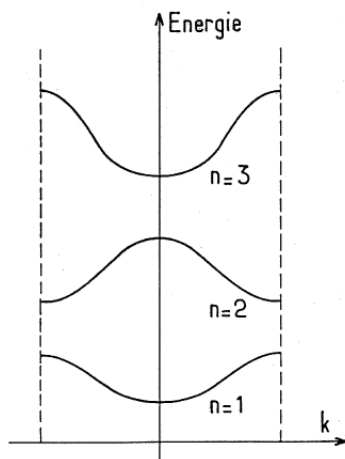


Figura 6: Representación esquemática de diferentes bandas de energía permitidas (en la primera zona de Brillouin) a lo largo de una dirección dada. Ellas están separadas por bandas de energía prohibidas.

El conjunto de valores $E_{n,\vec{k}}$ obtenidos para un valor de n fijo al variar \vec{k} en la primera zona de Brillouin es la n -ésima banda de energía permitida. Por otra parte, si N es el número de mallas cristalinas elementales, se puede mostrar que cada banda de energía permitida contiene N estados ($2N$ teniendo en cuenta el spin) independiente del número de átomos por malla elemental. Para conocer el estado fundamental de un cristal, se llenan a temperatura nula con los electrones de este cristal los estados de las distintas bandas de energías permitidas, comenzando por los estados de más baja energía. De esta forma se determina los estados ocupados por los electrones del cristal. Esto es importante ya que el llenado de bandas permite de determinar la naturaleza aislante o conductora de un sólido cristalino dado.

Se puede también representar la estructura de bandas por medio de la densidad de estados $D(E)$, que es tal que $D(E)dE$ es el número de estados cuya energía está contenida entre E y $E + dE$. La figura ?? presenta cualitativamente la densidad de estados del sodio: en cada banda de energía permitida corresponde una densidad de estados que se anula cuando se entra en una banda de energía prohibida.

Los métodos teóricos y los cálculos necesarios para la determinación de las estructuras de bandas son complicadas y sobrepasan largamente el cuadro de este curso. Nosotros no vamos (felizmente) a calcular la estructura de banda de los materiales semiconductores que vamos a estudiar. Utilizaremos únicamente ciertos aspectos de su estructura de bandas que son bien conocidos y que no tenemos necesidad de calcular por nuestra cuenta.

5. Metales, aislantes y semiconductores

En un metal a temperatura nula ($T = 0 K$), todos los estados de la banda de valencia son ocupados mientras que aquellos de la banda de conducción sólo lo están parcialmente. Es la situación que describe la figura ??, ella representa la densidad de estados $D(E)$ del sodio que

contiene 11 electrones por átomo. Hay $11 N$ electrones a colocar en las bandas ya que cada cristal de sodio contiene N mallas cristalinas con un átomo por malla elemental. Todos los estados de las bandas inferiores son ocupados por electrones ($10 N$ en total), y ellas son las bandas de valencia. En consecuencia, hay N estados ocupados por los electrones en la banda de energía superior. Ella está parcialmente ocupada y constituye la banda de conducción. Los estados de la banda de conducción están ocupados hasta el potencial químico μ , a menudo llamado nivel o energía de Fermi E_F .

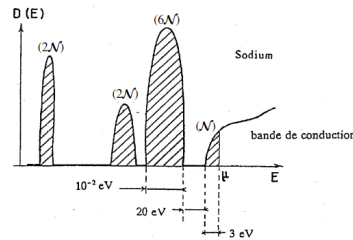


Figura 7: Densidad de estados de un cristal de sodio

Existe entonces un estado desocupado infinitamente cercano en energía al último estado ocupado. Se trata entonces de un conductor ya que si se aplica un campo eléctrico, incluso extremadamente débil y a $T = 0 K$, un electrón podrá adquirir energía al pasar de un estado ocupado a un estado vacío, induciendo así una corriente eléctrica en el sólido considerado. La resistividad de un metal a $300 K$ es típicamente del orden de $10^{-6} \Omega cm$.

En el caso de un aislante, la situación se representa en la figura ??, que muestra esquemáticamente la densidad de estados de la estructura de bandas $E(\vec{k})$ de un aislante donde se muestra la última banda de valencia (es decir la más alta en energía) y la primera banda de conducción separadas por una banda de energía prohibida cuyo valor mínimo E_g es llamado **gap**. Si E_c y E_v corresponden respectivamente al mínimo y al máximo de las bandas de conducción y de valencia, $E_g = E_c - E_v$. A $T = 0 K$, todos los estados de esta banda de valencia son ocupados por los electrones, y todos aquellos de la banda de conducción están vacíos. A causa de la existencia de un gap finito, un campo eléctrico infinitesimal no podrá promover un electrón desde un estado lleno a uno vacío, y no habrá conducción eléctrica. En un aislante, $E_g \geq 5 eV$, mientras que kT vale aproximadamente $25 meV$ a $300 K$. En consecuencia, a temperatura ambiente, el número de electrones excitados térmicamente desde la banda de valencia hacia la banda de conducción es necesariamente extremadamente débil. Resulta entonces que a $300 K$ un aislante es un muy mal conductor y que su resistividad, que puede ser del orden de $10^{22} \Omega cm$ a temperatura ambiente, es necesariamente grande ya que el número de electrones que pueden participar de la conducción eléctrica es muy débil.

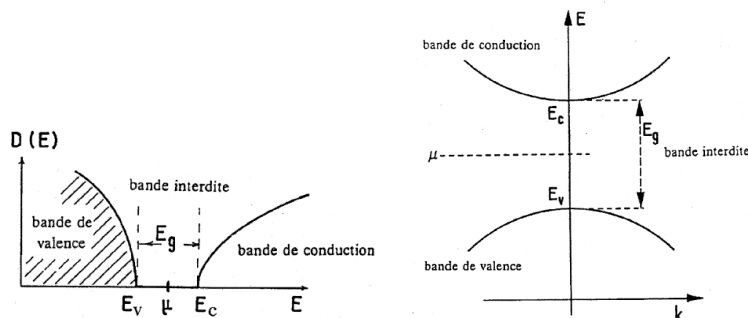


Figura 8: Densidad de estados y estructura de bandas de un aislante.

Un semiconductor es un aislante cuyo gap es suficientemente pequeño para que el número o la densidad de electrones excitados térmicamente a 300 K de la banda de valencia a la banda de conducción sea apreciablemente más grande que en un aislante. Los semiconductores son entonces mejores conductores que los aislantes y sus resistividades varían entre 10^{-3} y $10^9\ \Omega\text{ cm}$ a temperatura ambiente según el material considerado. En cuanto al gap de los semiconductores, varía entre 0 y 5 eV.

6. Postulados de la mecánica cuántica

Resumen

1. La descripción del estado de una partícula en el espacio se logra por una función de onda $\psi(\vec{x}, t)$ donde su módulo cuadrado da la densidad de probabilidad de presencia en el punto \vec{x} al instante t .
2. La evolución en el tiempo de la función de onda de una partícula colocada en un potencial $V(r)$ se obtiene a partir de la ecuación de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{x}, t) = \hat{H} \psi(\vec{x}, t)$$

donde el observable energía \hat{H} , o hamiltoniano del sistema, es:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V(r)$$

3. Para un sistema aislado en un potencial independiente del tiempo, los estados estacionarios son los estados propios de la energía, con una función de onda de la forma:

$$\psi(\vec{x}, t) = \psi_\alpha(\vec{x}) e^{-iE_\alpha t/\hbar}$$

donde ψ_α es una solución normada ($\int_{\mathbb{R}^3} d^3x |\psi_\alpha|^2 = 1$) de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo:

$$\hat{H} \psi_\alpha(\vec{x}) = E_\alpha \psi_\alpha(\vec{x})$$

La evolución en el tiempo de toda función de onda $\psi(\vec{x}, t)$ se escribe inmediatamente una vez conocidas las soluciones estacionarias:

$$\psi(\vec{x}, t) = \sum_{\alpha} C_{\alpha} e^{-iE_{\alpha} t/\hbar} \psi_{\alpha}(\vec{x}), \quad \text{con} \quad C_{\alpha} = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \psi_{\alpha}^*(\vec{x}) \psi(\vec{x}, t=0)$$

4. El problema de un electrón en un potencial periódico posee como soluciones estacionarias a las funciones de Bloch:

$$\psi_{n,\vec{k}}(\vec{x}) = u_{n,\vec{k}}(\vec{x}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}$$

donde $u_{n,\vec{k}}(\vec{x})$ tiene la misma periodicidad que el potencial. Para n fijo, al variar \vec{k} se obtiene una función cuasi-continua $E_n(\vec{k})$, que constituye la n -ésima banda de energía. El espectro entonces está constituido por bandas de energía permitidas y prohibidas para el electrón. Esto determina las propiedades de conducción eléctrica de un cristal.

7. Estadística de los electrones: función de Fermi-Dirac

Se muestra en física estadística que la probabilidad para que un estado de energía E sea ocupado por un electrón (fermión) está dada por la función de Fermi-Dirac $f(E)$:

$$f(E) = \frac{1}{1 + e^{\beta(E-\mu)}}$$

donde $\beta = 1/k_B T$ y μ es el potencial químico (también llamado e_F). La forma de $f(E)$ se muestra en la figura siguiente:

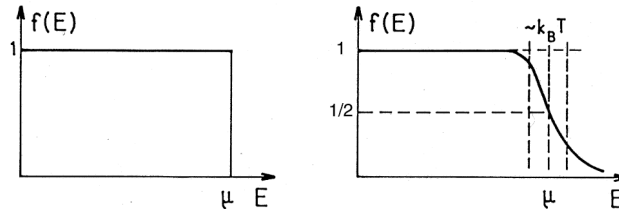


Figura 9: Variación de $f(E)$ para $T = 0$ y $T \neq 0$

El potencial químico es la variación de la energía libre de un sistema cuando se introduce una partícula suplementaria a una temperatura dada. Si dos sistemas pueden intercambiar partículas de la misma naturaleza, al equilibrio termodinámico el potencial químico es idéntico para los dos sistemas. El sistema cuyo potencial químico es mayor cede partículas al otro hasta que se igualan los potenciales químicos. Si se tiene un sistema de partículas sin masa, $\mu = 0$.

8. Constantes y propiedades eléctricas de distintos materiales.

Resistividad en ohm-metros, medidos a 1 atm y a 20° C:

Material	Resistividad	Material	Resistividad
<i>Conductor</i>		<i>Semi-Conductores</i>	
Plata	$1,59 \times 10^{-8}$	Agua Salada	$4,4 \times 10^{-2}$
Cobre	$1,68 \times 10^{-8}$	Germanio	$4,6 \times 10^{-1}$
Oro	$2,21 \times 10^{-8}$	Diamante	2,7
Aluminio	$2,65 \times 10^{-8}$	Silicio	$2,5 \times 10^3$
Hierro	$9,61 \times 10^{-8}$	<i>Aislantes</i>	
Mercurio	$9,58 \times 10^{-7}$	Agua pura	$2,5 \times 10^5$
Nicromo	$1,00 \times 10^{-6}$	Madera	$10^8 - 10^{11}$
Manganeso	$1,44 \times 10^{-6}$	Vidrio	$10^{10} - 10^{14}$
Grafito	$1,4 \times 10^{-5}$	Cuarzo	$\sim 10^{16}$

Susceptibilidades magnéticas a 1 atm y 20°C:

Material	Susceptibilidad	Material	Susceptibilidad
<i>Diamagnetico</i>		<i>Paramagnetico</i>	
Bismuto	$-1,6 \times 10^{-4}$	Oxígeno	$1,9 \times 10^{-6}$
Oro	$-3,4 \times 10^{-5}$	Sodio	$8,5 \times 10^{-6}$
Plata	$-2,4 \times 10^{-5}$	Aluminio	$2,1 \times 10^{-5}$
Cobre	$-9,7 \times 10^{-6}$	Tungsteno	$7,8 \times 10^{-5}$
Agua	$-9,0 \times 10^{-6}$	Platinio	$2,8 \times 10^{-4}$
CO_2	$-1,2 \times 10^{-8}$	Oxígeno líquido (-200 °C)	$3,9 \times 10^{-3}$
Hidrógeno	$-2,2 \times 10^{-9}$	Gadolinio	$4,8 \times 10^{-1}$

Constantes dieléctricas, a 1 atm y 20 °C:

Material	Constante Dieléctrica	Material	Constante Dieléctrica
Vacío	1	Benceno	2,28
Helio	1,000065	Diamante	5,7
Neon	1,00013	Sal	5,9
Hidrógeno	1,00025	Silicio	11,8
Argón	1,00052	Metanol	33
Aire(seco)	1,00054	Agua	80,1
Nitrógeno	1,00055	Hielo(30°C)	99
Vapor de agua (100°C)	1,00587	$KTaNbO_3$	34 000

Gaps de diferentes semiconductores a 300 K.

Cristal	E_g (eV)	Cristal	E_g (eV)
Diamante	5,33	PbS	0,34
Si	1,12 (1,17 a 4 K)	PbSe	0,27
Ge	0,67	PbTe	0,30
InSb	0,23	CdS	2,42
InAs	0,33	CdSe	1,74
InP	1,25	CdTe	1,8
GaAs	1,43 (1,52 a 4 K)	ZnO	3,2
AlSb	1,6	ZnS	3,6
GaP	2,25	ZnSe	2,60
SiC	3	AgCl	3,2
Te	0,33	AgI	2,8
ZnSb	0,56	Cu_2O	2,1
GaSb	0,78	TiO_2	3

9. Algunas unidades y constantes fundamentales

:

Unidades	
Ångstrom	$1\text{Å} = 10^{-10}m$ (\sim tamaño de un átomo)
Fermi	$1fm = 10^{-15}m$ (\sim tamaño de un núcleo)
ElectronVolt	$1eV = 1,60218 \cdot 10^{-19}J$
Constantes Fundamentales	
Constante de Planck	$h = 6,6261 \cdot 10^{-34}Js$
Cte. Planck h-barra	$\hbar = h/2\pi = 1,054 \cdot 10^{-34}Js$
Velocidad de la luz	$c = 299\,792\,458\,m/s$
Permeabilidad del vacío	$\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7}$ y $\epsilon_0\mu_0c^2 = 1$
Constante de Boltzmann	$k_B = 1,38 \cdot 10^{-23}JK^{-1}$
Número de Avogadro	$N_A = 6,0221 \cdot 10^{23}$
Carga del electrón	$q_e = -1,602 \cdot 10^{-19}C$
Masa del electrón	$m_e = 9,1094 \cdot 10^{-31}kg$
Masa del protón	$m_p = 1,672 \cdot 10^{-27}kg$

9.0.1. Problema 1

a) Considere un gas de electrones independientes en su estado fundamental (a temperatura nula, $T = 0 K$). Calcule la energía de fermi $E_F(T = 0)$ en términos de la densidad del gas y de constantes fundamentales. Calcule la temperatura de fermi ($E_F = k_B T_F$) de un gas de electrones de conducción en el cobre (densidad $8,47 \times 10^{28} m^{-3}$) a $T = 0$, qué puede decir sobre el comportamiento del cobre a temperatura ambiente?

b) Las enanas blancas son estrellas de brillo anormal para su color. Están compuestas principalmente de helio y la temperatura es del orden de $10^7 K$. Son estrellas muy densas: sus masas son del orden de la masa del sol, es decir $10^{30} kg$, pero la densidad es del orden de $10^{10} kg/m^3$. Muestre que se espera que los átomos de helio estén totalmente ionizados. Calcule la temperatura de fermi de los electrones que provienen de la ionización de los átomos. Deduzca que el gas de electrones a $10^7 K$ puede considerarse como un gas de electrones a temperatura nula.

9.0.2. Solución

a) El problema de un electrón encerrado en un volumen paralelepípedo de lados L_x, L_y, L_z fue resuelto en la ayudantía 2. Las funciones de onda estacionarias (autoestados del hamiltoniano) son de la forma:

$$\psi_{n_1, n_2, n_3}(\vec{x}) = \frac{2^{3/2}}{L_x L_y L_z} \sin(k_x x) \sin(k_y y) \sin(k_z z)$$

donde los valores de $\vec{k} = (k_x, k_y, k_z)$ están cuantizados por las condiciones de borde:

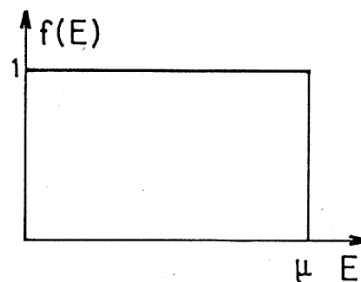
$$k_x = \frac{n_x \pi}{L_x} \quad k_y = \frac{n_y \pi}{L_y} \quad k_z = \frac{n_z \pi}{L_z}$$

con $n_i = 1, 2, 3, \dots$ (números cuánticos), y $i = x, y, z$. La energía asociada al estado (n_x, n_y, n_z) es:

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\left(\frac{n_x}{L_x} \right)^2 + \left(\frac{n_y}{L_y} \right)^2 + \left(\frac{n_z}{L_z} \right)^2 \right)$$

Si se tiene entonces un gas con N electrones a temperatura nula, el sistema estará en su estado fundamental (mínima energía). De esta manera, cada nivel de energía $E_{n_x n_y n_z}$ contendrá máximo 2 electrones (principio de exclusión de Pauli), la energía máxima que podrá tener un electrón será la energía de fermi E_F . Luego, la probabilidad de ocupación de un estado de energía E será:

$$f(E) = \begin{cases} 1 & 0 \leq E \leq E_F \\ 0 & E > E_F \end{cases}$$



De esta forma, el número de electrones se relaciona con la energía de Fermi de la siguiente manera:

$$N = 2 \sum_{n_x=1}^{\infty} \sum_{n_y=1}^{\infty} \sum_{n_z=1}^{\infty} f(E_{n_x n_y n_z})$$

Esta sumatoria no es fácil de calcular, en efecto, los límites superiores de cada sumatoria no son evidentes, además la complejidad aumenta cuando el cálculo se realiza a temperatura no nula, pues la distribución de fermi-dirac adopta una forma no trivial. Una técnica muy utilizada es transformar esta sumatoria en una integral sobre los posibles niveles de energía, que forman un casi-continuo en la medida en que el volumen del gas $V = L_x L_y L_z$ sea grande.

La técnica es la siguiente: los posibles valores que toma el vector de onda $\vec{k} = (k_x, k_y, k_z)$ constituyen los nodos de una red cúbica en la región $k_x \geq 0, k_y \geq 0, k_z \geq 0$ del espacio k_x, k_y, k_z . De esta forma, cada nodo (cada estado posible) tiene 6 vecinos y ocupa un volumen $\frac{\pi^3}{L_x L_y L_z} = \frac{\pi^3}{V}$. Así, el número de estados cuánticos que cumple con $k \leq |\vec{k}| \leq k + dk$ es:

$$dN = \frac{4\pi k^2 dk / 8}{\pi^3 / V} = \frac{V k^2 dk}{2\pi^2}$$

Si tomamos en cuenta que cada estado cuántico admite 2 valores posibles para el spin, el número correcto es:

$$dN = \frac{V k^2 dk}{\pi^2}$$

Finalmente, como la energía se relaciona con \vec{k} según:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad \rightarrow \quad k dk = \frac{m}{\hbar^2} dE \quad k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}$$

Luego:

$$dN = \frac{V \sqrt{2m}^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E} dE$$

definimos la **densidad de estados** $D(E)$ de forma que $D(E)dE$ es el número de estados que tienen una energía entre E y dE :

$$D(E) = \frac{dN}{dE} = \frac{V \sqrt{2m}^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E}$$

De esta manera, el número de electrones que tienen una energía entre E y dE es:

$$f(E)D(E)dE$$

y el número total de electrones en el gas es:

$$N = \int_0^{\infty} dE D(E) f(E)$$

a temperatura nula:

$$N = \int_0^{E_F} dE D(E) = \frac{V \sqrt{2m}^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \int_0^{E_F} dE \sqrt{E}$$

$$N = \frac{V \sqrt{2m}^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \frac{2}{3} E_F^{3/2}$$

Como $n = N/V$ es la densidad de electrones:

$$n = \frac{(2m)^{3/2}}{3\pi^2\hbar^3} E_F^{3/2}$$

y la energía de Fermi es:

$$E_F = (3\pi^2)^{2/3} \frac{\hbar^2}{2m} n^{2/3} = k_B T_F$$

con k_B la constante de Boltzmann. Vemos que a mayor densidad, mayor es la temperatura de fermi. Para un gas de electrones de conducción en el cobre, cuya densidad es $n = 8,47 \times 10^{28} \text{ m}^{-3}$, se obtiene a temperatura nula:

$$E_F = (3\pi^2)^{2/3} \frac{(1,054 \times 10^{-34})^2}{2 \times 9,1 \times 10^{-31}} n^{2/3}$$

$$E_F = 7,03 \text{ eV}$$

considerando que la energía térmica a temperatura ambiente es $k_B T = 26 \text{ meV} \ll E_F(T = 0)$, se obtiene que los electrones de conducción en el cobre a temperatura ambiente se comportan como un gas de electrones a temperatura nula! ($T_F \gg T$).

b) A una temperatura de 10^7 K la energía cinética de los átomos es entonces del orden del millón de electron-volts, mientras que la energía de ionización es de unas cuantas decenas de electron volts. Los átomos pierden sus electrones producto de las colisiones. Se tiene entonces un gas de 2 electrones por átomo de Helio.

La densidad de electrones se deduce como sigue: la masa de un átomo de helio es $4/(6 \times 10^{23}) \text{ g}$. Por m^3 hay entonces $10^{10} \times (6 \times 10^{23})/4$ átomos, es decir 3×10^{36} electrones por m^3 . La temperatura de fermi es entonces:

$$T_F = \frac{\hbar^2}{2mk_B} (3\pi^2 n)^{2/3} = 8,8 \times 10^9 \text{ K} \gg k_B T \sim 10^7 \text{ K}$$

Se ve entonces que el gas de electrones es tan denso que la temperatura de fermi es mucho mayor que la temperatura de la estrella, y el gas se comporta (en una muy buena aproximación) como si estuviera en el cero absoluto.

9.0.3. Problema 2

- Determine el máximo valor permitido para el gap de un semiconductor para que éste sea sensible a la luz amarilla ($\lambda = 600 \text{ nm}$).
- Un fotodetector de área $5 \times 10^{-2} \text{ cm}^2$ se irradia con luz amarilla de intensidad 2 mW cm^{-2} . Asumiendo que cada fotón excita a un electrón desde la banda de valencia hasta la banda de conducción, calcule el número de electrones excitados por segundo.
- Sabiendo que el GaAs tiene un gap $E_g = 1,42 \text{ eV}$, calcule la longitud de onda que emite este cristal cuando un electrón excitado en la banda de conducción vuelve a la banda de valencia.
- Es esta luz visible?
- Sería un fotodetector de silicio sensible a la radiación emitida por un laser de GaAs? Por qué?

9.0.4. Solución

a) La energía de un foton de longitud de onda $\lambda = 600 \text{ nm}$ es:

$$E_{ph} = \frac{hc}{\lambda}$$

Si el semiconductor posee un gap superior a E_{ph} , no sera sensible a la luz amarilla. De esta forma el máximo gap permitido es:

$$E_g = \frac{hc}{\lambda} = \frac{6,6 \times 10^{-34} \times 3 \times 10^8}{600 \times 10^{-9}} = 3,31 \times 10^{-19} \text{ J}$$

$$E_g = 2,07 \text{ eV}$$

b) Dado que el área de detección es $A = 5 \times 10^{-2} \text{ cm}^2$ y que la intensidad de la luz es $I = 2 \times 10^{-3} \text{ W/cm}^2$, la potencia recibida es:

$$P = AI = (5 \times 10^{-2} \text{ cm}^2) \times (2 \times 10^{-3} \text{ W/cm}^2) = 10^{-4} \text{ W}$$

El número de fotones que llega por segundo es:

$$N_{ph} = \frac{P}{E_{ph}} = \frac{10^{-4} \text{ W}}{3,31 \times 10^{-19} \text{ J}} = 3,02 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$$

Assumiendo que cada fotón excita un electrón, el número de electrones excitados a la banda de conducción por segundo es:

$$N = 3,02 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$$

c) Para el GaAs, se tiene un gap $E_g = 1,42 \text{ eV}$. Cuando un electrón excitado cae a la banda de valencia, emite un fotón de energía E_g , luego su longitud de onda es:

$$\lambda = \frac{hc}{E_g} = \frac{(6,6 \times 10^{-34}) \times 3 \times 10^8}{1,1 \text{ eV} \times 1,602 \times 10^{-19} \text{ J/eV}}$$

$$\lambda = 1,13 \times 10^{-6} \text{ m} = 1130 \text{ nm}$$

d) No, los fotones emitidos caen en el rango infrarojo. e) Un laser de GaAs se basa en la emisión de luz a 1130 nm debido al decaimiento de los electrones desde la banda de conducción a la banda de valencia. Como estos fotones tienen una energía de $1,42 \text{ eV}$, mayor al gap del silicio ($E_g = 1,12 \text{ eV}$), un fotodetector hecho de Silicio puede captar la luz laser de GaAs.

9.0.5. Problema 3

Las teorías cosmológicas usuales predicen que el universo contiene no solamente una densidad de radiación uniforme al equilibrio térmico de $2,7 \text{ K}$, sino que también una distribución de equilibrio de neutrinos a la misma temperatura.

Los neutrinos son partículas de spin $1/2$ (i.e. fermiones), pero la experiencia muestra que su spin es siempre paralelo al momentum p . Son partículas de masa nula, luego su energía está dada por $E = c|\vec{p}|$. Los neutrinos presentes en un volumen Ω a temperatura T pueden ser creados o absorbidos por las paredes de manera tal que su número no es fijo.

Se pide encontrar:

1. El número medio de neutrinos por cm^3

2. La energía media
3. La forma general del espectro de energía

Puede considerar lo siguiente:

$$\int_0^{\infty} dx \frac{x^2}{1+e^x} = \frac{3}{2} \zeta(3) = 1,803$$

$$\int_0^{\infty} dx \frac{x^3}{1+e^x} = \frac{7\pi^4}{120} = 5,671$$

Considere que el potencial químico es cero.

9.0.6. Solución

1. Para este caso el factor de fermi será:

$$f = \frac{1}{1+e^{\beta x}}$$

Y la densidad de estados cumple también la fórmula:

$$\frac{4\pi k^2 dk}{8(\pi^3/\Omega)}$$

En este caso tenemos $k = p/\hbar = E/(c\hbar)$, $dk = dE/(c\hbar)$ y $k^2 = E^2/(c^2\hbar^2)$, luego, reemplazando obtenemos que la densidad de estados será (recordar que $\hbar = h/2\pi$):

$$D(E) = \frac{\Omega 4\pi E^2 dE}{c^3 \hbar^3}$$

Entonces, podemos calcular el número medio de neutrinos:

$$\begin{aligned} \langle N \rangle &= \int_0^{\infty} dE f(E) D(E) = \frac{4\pi\Omega}{h^3 c^3} \int_0^{\infty} \frac{dE E^2}{e^{\beta E} + 1} \\ &= \frac{4\pi\Omega}{h^3 c^3} \left(\frac{1}{\beta^3} \right) \int_0^{\infty} \frac{dx x^2}{1+e^x} \end{aligned}$$

Que, reemplazando los valores correspondientes da:

$$\frac{\langle N \rangle}{\Omega} = 7,6 \cdot 10^6 T^3 (m^{-3})$$

A T=2,7 K tenemos entonces una centena de neutrinos por centímetro cuadrado.

2. La energía media vendrá dada por:

$$\begin{aligned}
 U = \langle E \rangle &= \int_0^{\infty} dE f(E) E D(E) \\
 &= \frac{4\pi\Omega}{h^3 c^3} \left(\frac{1}{\beta}\right)^4 \int_0^{\infty} dx \frac{x^3}{1 + e^x} \\
 &= \frac{7}{30} \pi^5 \frac{\Omega}{h^3 c^3} k^4 T^4
 \end{aligned}$$

Es decir:

$$\begin{aligned}
 \frac{U}{\Omega} &= \frac{7}{16} \frac{\pi^2}{15} \frac{(kT)^4}{(hc)^3} \\
 &= 3,3 \cdot 10^{-16} T^4 \text{ (J/m}^3\text{)}
 \end{aligned}$$

3. La repartición de energía está dado por:

$$u(E) = E f(E) D(E) \propto \frac{E^3}{1 + e^{\beta E}}$$

9.0.7. Problema 4

Se considera un gas de electrones «libres» obligados a moverse en un plano:

1. Muestre que la densidad de niveles de energía es independiente de E
2. Determine a temperatura cero la energía de Fermi en función de la densidad.

9.0.8. Solución

1. Debemos contar el número de estados entre k y $k + dk$:

El área vendrá dada por: $2\pi k dk$.

Por otro lado, los diferentes estados están separados por π/L , es decir un estado ocupa un área de π^2/Ω con $\Omega = L^2$.

A la vez, sabemos que la energía viene dada por $E = k^2 \frac{\hbar^2}{2m}$, luego $2k dk = \frac{2m}{\hbar^2} dE$

De esta manera, si consideramos que como k debe ser siempre positivo, sólo tomamos un cuarto de circunferencia, y que el spin puede tener 2 valores tomaremos el área de los estados entre k y $k+dk$ para dividirlo por el área ocupada por un solo estado:

$$\begin{aligned}
 dN &= \frac{2\pi k dk}{\pi^2/\Omega} \\
 &= 2 \times 1/4 \frac{2m\pi dE}{\hbar^2 \pi^2/\Omega} \\
 &= \frac{4\pi\Omega m dE}{h^2}
 \end{aligned}$$

De aquí reconocemos la densidad de estados:

$$D(E) = \frac{4\pi\Omega m dE}{h^2}$$

2. A temperatura nula solo los niveles de energía inferior a la de Fermi serán ocupados:

$$N = \int_0^{E_F} dE D(E) = E_F$$

Por lo que obtenemos que:

$$E_F = \frac{h^2}{4\pi m} \frac{N}{\Omega}$$