Grado en Física. 4º curso 16 Enero 2018

Física Estado Sólido I: Examen final. Soluciones Cuestiones

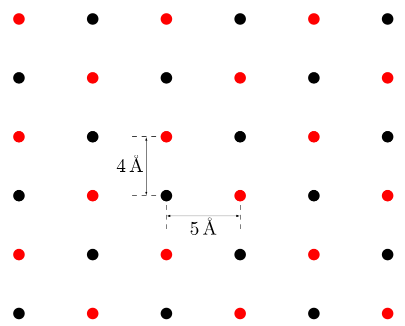
Cada ejercicio se valorará de acuerdo a las puntuaciones indicadas, asignándose una puntuación proporcional a ejercicios incompletos o con errores. Duración 90 minutos.

1. **(20 puntos)** En la figura adjunta se muestran las posiciones atómicas de un cristal bidimensional que contiene dos tipos de átomos (en rojo y negro).

   (a) Dibujar dos vectores que formen una base primitiva y dar los valores numéricos de dichos vectores, con sus unidades correspondientes.

   (b) Dibujar la primera zona de Brillouin, ¿cuál es su superficie?

   (c) Cuáles serán las respuestas a los apartados anteriores si todos los átomos fueran del mismo tipo?

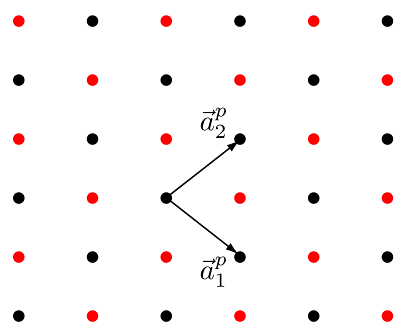


Solución:

Parámetros de la celda centrada, $a = 10\mathring{A}$, y $b = 8\mathring{A}$.

(a) En la celda primitiva $|\vec{a}_1^p| = |\vec{a}_2^p| = \sqrt{41}$:

$$\vec{a}_1^p = \frac{1}{2}(a, b)$$
$$\vec{a}_2^p = \frac{1}{2}(a, -b)$$

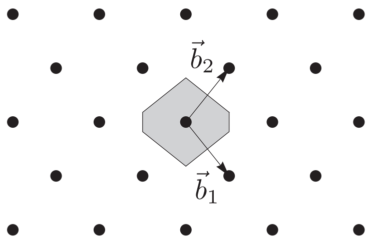


(b) Parámetros de la celda recíproca primitiva:

$$\vec{b}_1^p = \pi\left(\frac{1}{a},\frac{1}{b}\right)$$
$$\vec{b}_2^p = \pi\left(\frac{1}{a},-\frac{1}{b}\right)$$

(c) Primera zona de Brillouin,

$$\left|\vec{b}_1 \times \vec{b}_2\right| = \frac{2\pi^2}{ab} = 0.25\text{Å}^{-2}$$



(d) Si todos los átomos fueran idénticos,

$$\vec{a}_1^p = \frac{1}{2}(a,0)$$
$$\vec{a}_2^p = \frac{1}{2}(0,b)$$

Y para la celda primitiva:

$$\vec{b}_1^p = \frac{4\pi}{a}(1,0)$$
$$\vec{b}_2^p = \frac{4\pi}{b}(0,1)$$

La primera zona de Brillouin es un rectángulo de lados $4\pi/a$ y $4\pi/b$, con área$16\pi^2/(ab) = 1.97\text{Å}^{-2}$.

2. (**20 puntos**) Considerar un semiconductor (por ejemplo Ge), a temperatura ambiente ($T = 300$) K.

(a) Si el semiconductor no tiene impurezas, obtener una expresión para calcular la densidad de electrones en la banda de conducción, que pueda ser evaluada con los datos que se dan abajo y valores de constantes fundamentales. Calcular su valor numérico.

(b) Demostrar que, en las condiciones anteriores, el potencial químico viene dado por:

$$\mu = E_v + \frac{1}{2}E_g + \frac{1}{2}k_B T \ln(\frac{P_v}{N_c})$$

(c) Justificar el rango de temperaturas en el que es aplicable el resultado anterior

(d) Si se añaden 10^{16} impurezas/cm^3 de tipo "donante", presentar un argumento que permita estimar el número de impurezas ionizadas. Si $N_c = 10^{19}\ cm^{-3}$, estimar la fracción de estados de la banda de conducción que estarán ocupados

Datos para el Ge: $E_g = 600$ meV, $m_e^*/m_e = 0.55$, $m_h^*/m_e = 0.37$, $E_c - E_d = 0.01$ eV.

$$n_c = N_c \exp\left[-(E_c - \mu)/k_B T\right] \text{ con } N_c = 2(\frac{m_e^* k_B T}{2\pi\hbar^2})^{3/2}$$

$$p_v = P_v \exp\left[-(\mu - E_v)/k_B T\right] \text{ con } P_v = 2(\frac{m_h^* k_B T}{2\pi\hbar^2})^{3/2}$$

Solución:

(a) Un semiconductor sin impurezas se encuentra en el régimen intrínseco donde $n_c = p_v = n_i$ con $n_i^2 = n_c p_v$. Utilizando las expresiones dadas:

$$n_i^2 = N_c P_v e[-(E_c - E_v)/k_B T] = N_c P_v e^{-E_g/k_B T} = 4(\frac{m_e^* k_B T}{2\pi\hbar^2})^{3/2}(\frac{m_h^* k_B T}{2\pi\hbar^2})^{3/2} e^{-E_g/k_B T} =$$

$$= \frac{1}{2\pi^3}(\frac{n_e^* m_h^*}{m_e^2})^{3/2}(\frac{m_e^2 k_B T}{\hbar^2})^3 e^{-E_g/k_B T}$$

Sustituyendo los valores numéricos dados obtenemos $n_i = 7.09 \times 10^{13}$ electrones/cm^{-3}.

(b) De la condición $n_c = p_v$ se obtiene:

$$N_c e^{-(E_c-\mu)/k_B T} = P_v e^{-(\mu - E_v)/k_B T}$$

$$\frac{P_v}{N_c} = e^{(\mu - E_v - E_c + \mu)/k_B T} = e^{(2\mu - E_v - E_c)/k_B T}$$

Dado que $E_g = E_c - E_v$ de donde $E_v = E_c - E_g$ que sustituimos en la ecuación anterior obteniendo:

$$\frac{P_v}{N_c} = e^{(2\mu - 2E_v - E_g)/k_B T}$$

$$\mu = E_v + \frac{1}{2}E_g + \frac{1}{2}k_B T \ln \frac{P_v}{N_c}$$

(c) En las expresiones anteriores, siempre se ha asumido que $E_c - \mu >> k_B T$ y $\mu - E_v >> k_B T$, lo que nos permite aproximar la estadística de Fermi a una estadística de Boltzman; es decir, a temperatura ambiente estaríamos en condiciones tales que la ocupación de la banda de conducción es muy baja. En concreto tenemos que $k_B T(T = 300) = 0.026$ eV y $N_c \simeq 10^{19} cm^{-3}$ que comparado con n_i nos dice que, en la banda de conducción, tenemos uno de entre 10^6 estados ocupados.

(d) Si se añaden 10^{16} donantes por cm^3, estos estarán ionizados prácticamente todos debido a la proximidad de su nivel de energía al mínimo de la banda de conducción $E_c - E_d = 0.01$eV. Por otra parte, N_c nos da el número efectivo de niveles en la banda de conducción que vale $N_c = 1.05 \times 10^{19} cm^{-3}$. Por lo tanto, la fracción de niveles de conducción ocupados puede estimarse en $10^{16}/10^{19} = 10^{-3}$, esto es, se ocupan uno de cada mil estados.