FÍSICA DEL ESTADO SÓLIDO I (Licenciatura)

PROBLEMAS RESUELTOS

Bloque C

Curso 2013-14

Problema C.1

Determine el número de estados electrónicos permitidos con energía inferior a 2 eV, para un electrón libre de un cristal en forma de cubo de lado 1 cm.

Solución

La densidad de estados, de acuerdo con la expresión (20), capítulo sexto de Kittel, es

$$D(E) = \frac{V}{2\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} E^{1/2}.$$

En consecuencia, el número de estados será

$$N = \int_0^2 \frac{4\pi V}{h^3}(2m)^{3/2} E^{1/2} dE = \frac{8\pi V(2mE)^{3/2}}{3h^3}$$

De acuerdo con el enunciado, $V = 10^{-6} m^3$ y $E = 2$ eV $= 2 \times 1{,}6 \times 10^{-19}$ J. Sustituyendo valores y operando,

$$N \cong 1{,}28 \times 10^{22} m^{-3}$$

Problema C.2

Se considera un cristal de litio (estructura cúbica centrada en el cuerpo, parámetro de red, a = 3,49 A). Suponiendo un modelo de electrones libres, determine:

a) el valor del radio de Fermi,

b) la relación que existe entre la superficie de Fermi y la primera zona de Brillouin,

c) la energía de Fermi y la temperatura de Fermi,

d) la velocidad máxima de los electrones libres,

e) el tiempo de relajación y el recorrido libre medio a temperatura ambiente, sabiendo que la resistividad tiene el valor $\rho = 10^{-5}$ Ω.cm,

f) la conductividad térmica, a temperatura ambiente.

Solución

Apartado a)

En el modelo de electrones libres la superficie de Fermi es esférica y tiene por radio, el radio de Fermi, k_F.

De la definición de superficie de Fermi se tiene la siguiente relación entre el volumen de la esfera de Fermi y el volumen de espacio-**k** asociado a un k,

$$\frac{\frac{4}{3}\pi k_F^3}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3} = \frac{N}{2}$$

donde N es el número de electrones (dos electrones por estado k),

Denotando por $n = N/L^3$ a la densidad de electrones, se tiene

$$k_F = \left(3\pi^2 n\right)^{\frac{1}{3}}$$

Para determinar el valor de la densidad de electrones, al ser el material c.c., y cada átomo aportar un electrón, existen dos electrones por celda unidad cúbica, luego

$$n = \frac{N}{V} = \frac{2}{\left(3,49\times10^{-8}\right)^3} \cong 4,7\times10^{22}\ \text{electrones.cm}^{-3}$$

Sustituyendo el valor de n, se tiene

$$k_F \approx 1,11\times10^8\ \text{cm}^{-1} = 1,11\times10^{10}\ \text{m}^{-1}$$

Apartado b)

La red recíproca de la c.c. es una red del espacio recíproco tipo c.c.c. de lado $\frac{4\pi}{a}$. El nudo más cercano al origen, en esta red, es el situado en la dirección (110), a distancia $\frac{2\pi\sqrt{2}}{a}$. Por tanto la distancia del origen al borde de la primera zona de Brillouin es

$$d_m = \frac{\pi\sqrt{2}}{a} = 1,27\times10^8\ \text{cm}^{-1}$$

Comparando este valor con el radio de Fermi se observa que $d_m > k_F$, por lo que se puede decir que la esfera de Fermi esta dentro de la primera zona de Brillouin.

Apartado c)

La energía de Fermi, de acuerdo con la expresión (17) del capítulo 6 de Kittel es,

$$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(3\pi^2 n\right)^{2/3} \cong 4,72\ \text{eV}$$

La temperatura de Fermi, será

$$T_F = \frac{E_F}{k_B} \approx 54.700 \text{ K}$$

Apartado d)

La velocidad máxima es la velocidad de Fermi, de acuerdo con cap.6, ec.(18),

$$v_F = \frac{\hbar k_F}{m} \approx 1{,}3 \times 10^6 \, m/s$$

(Es interesante que se compare la magnitud de la velocidad de Fermi con la velocidad de arrastre típica de un metal).

Apartado e)

Dado que [ec.(46), cap.6] la conductividad eléctrica se expresa,

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m} = \frac{1}{\rho}$$

de donde se tiene,

$$\tau = \frac{m}{ne^2\rho} \cong 0{,}76 \times 10^{-14} \text{ s}$$

El recorrido libre medio [ec. (45), cap.6) resulta,

$$\lambda = v_F \tau \cong 100 \text{ A}$$

Apartado f)

Como la conductividad térmica se expresa [ec. (42), cap.5]

$$\kappa = \frac{1}{3} v_F^2 \tau c_v \,,$$

haciendo uso de la expresión (36), cap.6, del calor específico,

$$c_v = \frac{\pi^2 n k_B^2 T}{2E_F}$$

resulta,

$$\kappa = \frac{\pi^2 n k_B^2 T v_F^2 \tau}{6E_F} \cong 75{,}065 \text{ wat.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$$

Problema C.3

Se considera un sólido metálico bidimensional constituido por átomos idénticos distribuidos en una red cuadrada de parámetro a = 3 A.

Determine:

a) la primera zona de Brillouin

b) la energía de los electrones cuyo vector de onda está en el borde de la primera zona de Brillouin, en la dirección [10] y [11]

c) la densidad de estados

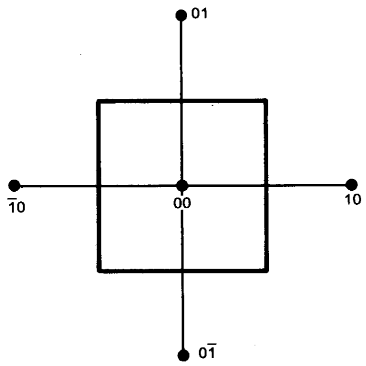
d) la energía media por electrón a 0 K

Solución

Apartado a)

Los vectores de la red real son **a**, **b**, (|**a**| =|**b**| = a, y **a**.**b** = 0), de manera que los vectores base de la red recíproca serán **a*** = 2π/**a**, **b*** =2π/**b**, y también son ortogonales entre sí.

En el espacio recíproco, las mediatrices de los segmentos 00-01 y equivalentes, delimitan un cuadrado de lado 2π/a centrado en (00), que constituye la primera zona de Brillouin.



Apartado b)

Como el sólido es metálico, se puede asumir para el sistema de electrones un modelo de electrones libres. En consecuencia, la relación de dispersión se expresa

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(k_x^2 + k_y^2\right)$$

En el borde de la primera zona, en la dirección [10], se tiene **k** = (π/a, 0), luego

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{a}\right)^2 \cong 4,23\text{eV}$$

En la dirección [11], el valor de **k** es ((π/a, π/a), luego

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}\left[\left(\frac{\pi}{a}\right)^2 + \left(\frac{\pi}{a}\right)^2\right] = \frac{2\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{a}\right)^2 \cong 8,46\text{eV}$$

Apartado c)

La densidad de estados es

$$D(E) = \frac{A}{(2\pi)^2}\oint_l \frac{dl_E}{|\nabla_k E|} = \frac{L^2}{(2\pi)^2}\frac{k}{|\nabla_k E|} = \frac{L^2}{2\pi}\cdot\frac{k}{\frac{\hbar^2 k}{m}}$$

$$= \frac{L^2}{2\pi}\cdot\frac{m}{\hbar^2}$$

Apartado d)

La energía media por electrón, a 0 K, viene dada por

$$\bar{E} = \frac{\int_0^{E_F} D(E)E\,dE}{\int_0^{E_F} D(E)\,dE}$$

Sustituyendo y operando, se tiene

$$\bar{E} = \frac{\frac{1}{2}E_F^2}{E_F} = \frac{1}{2}E_F$$

Es interesante comparar este valor y la expresión de la densidad de estados con los correspondientes a un cristal tridimensional (véase texto).

Problema C.4

Se considera un cristal bidimensional con una red rectangular de parámetros a y b, con a < b. La relación de dispersión electrónica se corresponde con la de un modelo de electrones cuasilibres, es decir, en una dirección dada [m, n] tiene la expresión de los electrones libres excepto cuando k está muy próximo al borde de la zona de Brillouin. En este caso, la curva de dispersión se desdobla de manera simétrica alrededor del valor E_0(m, n) de los electrones libres con una amplitud total U(m, n).

Se pide:

a) Representación de las relaciones de dispersión en las direcciones [1 0], [0 1] y [1 1].

b) Determinación de la relación que debe existir entre los diversos coeficientes U(m, n) y las constantes de red a y b para que el material sea aislante, si hay dos electrones libres por celda unidad.

c) Si U(1, 0) = 2 eV, U(0, 1) =1 eV, U(1, 1) = 1,5 eV; a =3 A, b =4 A ¿qué tipo de material es?

Solución

Apartado a)

La red recíproca asociada al cristal es rectangular y tiene de parámetros

$a^* = 2\pi/a$, $b^* = 2\pi/b$

La superficie encerrada por las normales en el punto medio, a estos vectores de red recíproca, proporciona la primera zona de Brillouin.

En la dirección [1 0] y en el borde de la zona de Brillouin, se tiene

$$E_0(1,0) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{a}\right)^2$$

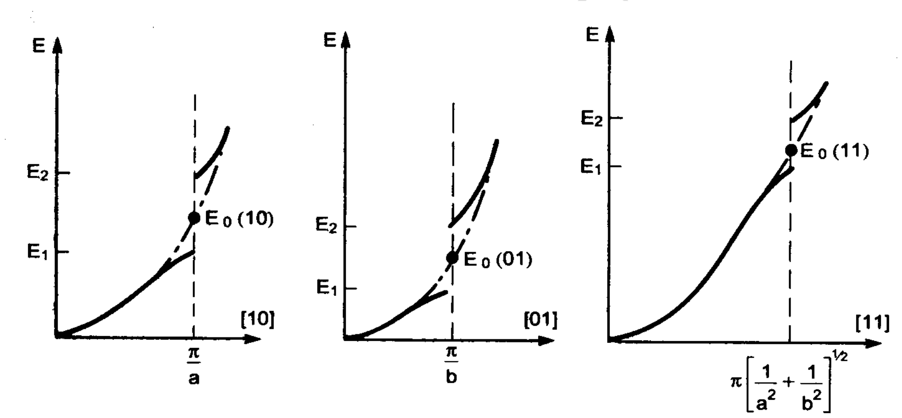
En la dirección [0 1]

$$E_0(0,1) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{b}\right)^2$$

En la dirección [1 1]

$$E_0(1,1) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}\left[\left(\frac{\pi}{a}\right)^2 + \left(\frac{\pi}{b}\right)^2\right]$$

Las relaciones de dispersión se muestran en la figura adjunta.



Apartado b)

Para que el material sea aislante la primera banda debe estar llena y las demás bandas no deben solaparse con ella. Si el número de celdas primitivas del cristal es N, en el caso en consideración la banda en la dirección [0 1] acepta los 2N electrones y se llena. De modo que, para que el material sea aislante, $E_2(01)$ debe ser mayor que $E_1(11)$ que, a su vez, es mayor que $E_1(1,0)$. Es decir,

$$E_0(01) + \frac{U_{01}}{2} > E_0(11) - \frac{U_{11}}{2}$$

y esto significa que

$$U_{01} + U_{11} > \frac{\hbar^2\pi^2}{ma^2}$$

Apartado c)

Para este caso,

$$U_{01} + U_{11} = 2{,}5 \text{ eV};$$

y como

$$\frac{\hbar^2\pi^2}{ma^2} \approx 8{,}25\text{eV}$$

se tiene que

$$U_{01} + U_{11} < \frac{\hbar^2\pi^2}{ma^2},$$

es decir, el material es conductor.

Problema C.5

Considere un cristal unidimensional de parámetro de red a y longitud L. Determine:

a) la relación de dispersión electrónica en la aproximación del enlace fuerte (denominado "enlace compacto" en Kittel, capítulo 9).

b) La densidad de estados de energía

Solución

Apartado a)

El cristal se puede asemejar a una cadena lineal con periodicidad a. Cada átomo de la cadena tiene dos vecinos más próximos, por lo que la relación de dispersión de los electrones en este caso se reduce a

$$E = \varepsilon_0 - \alpha - \gamma \sum_m e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_m} = \varepsilon_0 - \alpha - \gamma\left(e^{ika} + e^{-ika}\right)$$

de donde

$$E(k) = \varepsilon_0 - \alpha - 2\gamma \cos ka$$

Apartado b)

La densidad de estados es

$$D(E) = 2\frac{L}{2\pi}\frac{2}{\frac{\partial E}{\partial k}} = 2\frac{Na}{\pi}\frac{1}{2a\gamma \operatorname{sen} ka} = \frac{N}{\pi\gamma \operatorname{sen} ka}$$

Problema C.6

En la aproximación del enlace fuerte, la relación de dispersión de los electrones de un cristal viene dado por

$$E = \varepsilon_0 - \alpha - \gamma \sum_m e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_m}$$

con α, γ constantes positivas y r_m representando los vectores que ligan un átomo con sus m vecinos más próximos. Considere un cristal de estructura cúbica centrada en el cuerpo, con parámetro de red a.

a) Determine de forma explícita la relación de dispersión.

b) Indique los valores de E en el centro de la zona de Brillouin, en sus proximidades, así como en los bordes de la misma para las direcciones [100], [110] y [111].

c) Determine el ancho de esta primera banda.

Solución

Apartado a)

Se toma como origen un átomo esquina de la celda unidad cúbica Este átomo tiene ocho vecinos más próximos situados en todas las combinaciones posibles de a(±1/2, ±1/2, ±1/2). Sustituyendo estos ocho valores de $\mathbf{r}_m$ en la expresión general de la relación de dispersión y operando, se obtiene

$$\sum_m e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_m} = e^{ia(k_x+k_y+k_z)/2} + e^{-ia(k_x+k_y+k_z)/2} + e^{ia(k_x-k_y+k_z)/2} + e^{-ia(k_x-k_y+k_z)/2} +$$

$$+e^{ia(k_x+k_y-k_z)/2} + e^{-ia(k_x+k_y-k_z)/2} + +e^{ia(k_x-k_y-k_z)/2} + e^{-ia(k_x-k_y-k_z)/2} =$$

$$= 2\left(\cos\frac{k_x+k_y+k_z}{2}a + \cos\frac{k_x-k_y+k_z}{2}a + \cos\frac{k_x+k_y-k_z}{2}a + \cos\frac{-k_x+k_y+k_z}{a}a \right) =$$

$$= 4\cos\frac{k_y a}{2}\left(\cos\frac{k_x+k_z}{2}a + \cos\frac{k_x-k_z}{2}a \right)$$

De donde, finalmente, se tiene

$$E = -\alpha - 8\gamma \cos\frac{k_x a}{2}\cos\frac{k_y a}{2}\cos\frac{k_z a}{2}$$

Apartado b)

-- El centro de la zona de Brillouin corresponde a k = (0, 0, 0), y la energía es

$$E(0) = -\alpha - 8\gamma$$

-- En las proximidades del origen de la zona de Brillouin, se puede hacer la aproximación cos(x/2) ≈ 1 – x^2/2, así que

$$E = -\alpha - 8\gamma + \gamma k^2 a^2$$

-- En el extremo de la zona, en la dirección H [100], se tiene

$k = (2\pi/a, 0, 0)$ $\qquad$ $E(H) = -\alpha + 8\gamma$

Nótese que $k_x = 2\pi/a$ porque al estar trabajando con la celda unidad cúbica hay que considerar las extinciones sistemáticas, que en este caso significan que h + k + l = impar es prohibido.

-- En el extremo de la zona, en la dirección P [111], se tiene

$k = (\pi/a, \pi/a, \pi/a)$ $\qquad$ $E(P) = -\alpha$

-- En el extremo de la zona, en la dirección N [110]

$k = (\pi/a, \pi/a, 0)$ $\qquad$ $E = -\alpha$

Apartado c)

En cuanto al ancho de la banda, se observa de la relación de dispersión que la energía será mínima (máxima) para $\cos(k_x /a) = 1$ (–1), tomando los valores $E = -\alpha - 8\gamma$ y $E = -\alpha + 8\gamma$ luego la banda tendrá un tamaño de 16γ.

Problema C.7

*Determine la expresión de la masa efectiva para el cristal de estructura cúbica centrada en el cuerpo del problema resuelto C.6, en el punto **k** = 0.*

Solución

De acuerdo con el problema C.6, la relación de dispersión para este cristal es

$$E = -\alpha - 8\Gamma \cos\frac{k_x a}{2} \cos\frac{k_y a}{2} \cos\frac{k_z a}{2}$$

El tensor de masa efectiva, de acuerdo con la ecuación (29) del capítulo de Kittel, se define por

$$\left(\frac{1}{m^*}\right)_{ij} = \frac{1}{\hbar^2}\frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j}$$

De manera que se tiene,

$$\frac{\partial E}{\partial k_x} = -8\Gamma \frac{a}{2}\left(-\mathrm{sen}\frac{k_x a}{2}\right)\cos\frac{k_y a}{2}\cos\frac{k_z a}{2}$$

de donde resulta,

$$\frac{\partial^2 E}{\partial k_x^2} = 8\Gamma \left(\frac{a}{2}\right)^2 \cos\frac{k_x a}{2}\cos\frac{k_y a}{2}\cos\frac{k_z a}{2}$$

y expresiones análogas para $\partial^2 E / \partial k_y^2$, $\partial^2 E / \partial k_z^2$.

Los restantes términos del tensor son nulos para **k** = 0.

Pero, para **k** = 0, los cosenos tienen valor unidad, luego,

$$\left(\frac{1}{m^*}\right)_{ij} = \frac{1}{\hbar^2}\begin{pmatrix} 2\Gamma a^2 & 0 & 0 \\ 0 & 2\Gamma a^2 & 0 \\ 0 & 0 & 2\Gamma a^2 \end{pmatrix}$$

En el límite, el tensor de masa efectiva es un escalar de valor

$$m^* = \frac{\hbar^2}{2\Gamma a^2}$$

Problema C.8

Determine la velocidad, en la frontera de la zona de Brillouin, de un electrón que se mueve en el potencial unidimensional de Kronig-Penney.

Solución

El modelo de Kronig-Penney establece la siguiente relación de dispersión electrónica

$$\cos \alpha a + \frac{P}{\alpha a} \operatorname{sen} \alpha a = \cos ka$$

o bien

$$F(\alpha, k) = \cos \alpha a + \frac{P}{\alpha a} \operatorname{sen} \alpha a - \cos ka$$

siendo la relación con la energía a través de, $\alpha = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$.

La velocidad de los electrones de Bloch es

$$v = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial E}{\partial k}$$

Puesto que,

$$\frac{dF}{d\alpha} = \frac{\partial F}{\partial \alpha}\frac{d\alpha}{dk} + \frac{\partial F}{\partial k} = 0$$

de donde

$$\frac{d\alpha}{dk} = -\frac{\partial F/\partial k}{\partial F/\partial \alpha}$$

Teniendo en cuenta la expresión de F, derivando y sustituyendo se obtiene

$$\frac{\partial \alpha}{\partial k} = \frac{\operatorname{sen} ka}{\operatorname{sen} \alpha a - P\left[\frac{\cos \alpha a}{\alpha a} - \frac{\operatorname{sen} \alpha a}{(\alpha a)^2}\right]}$$

La frontera de la zona de Brillouin es para $k = n\frac{\pi}{a}$, lo que hace que $\operatorname{sen} ka = 0$ y, en consecuencia que la velocidad sea nula, v = 0.