

Introdução à Física do Estado Sólido

Física Moderna II-B

Caetano R. Miranda ***AULA 17 – 20/10/2022***

Carlos A. Martins Jr.



crmiranda@usp.br

Cronograma - revisado

CRONOGRAMA TENTATIVO - Introdução à Física do Estado Sólido - Física Moderna IIB - 2S 2022						
DATA	aula n°	Segundas (19h - 21h) - Sala 2001 - Ala Central	aula n°	Quartas (21h - 23h) - Sala 2001 - Ala Central	DATA	
15-Aug			1	Apresentação - Curso	18-Aug	ENTREGA 1
22-Aug	2	Revisão - Partículas e ondas - Chocolate	3	Átomos e Ions (Elétrons em átomos) - Tabela Periódica	25-Aug	
29-Aug	4	Átomos e Ions (Elétrons em átomos) - Simulação	5	Moléculas e sólidos (Elétrons em sólidos) - impressão 3D	01-Sep	
05-Sep	Feriado	Independência do Brasil. Não haverá aula.	Feriado	Independência do Brasil. Não haverá aula.	08-Sep	
12-Sep	6	Ordem e Simetria	7	Ondas em cristais – Estruturas cristalinas - Corte/Colar - Origem	15-Sep	
19-Sep	8	Estruturas - Átomos em cristais - VR1	9	Estruturas - Átomos em cristais - VR2	22-Sep	ENTREGA 2
26-Sep	10	Oficina - Construção Oculus VR	11	BNCC & Wikipédia	29-Sep	
03-Oct	12	Vibrações térmicas e Fônons	13	Vibrações térmicas e Fônons	06-Oct	
10-Oct	14	Elétrons livres	15	Elétrons livres	13-Oct	
17-Oct	16	Condutividade elétrica e teoria de bandas	17	Condutividade elétrica e teoria de bandas	20-Oct	
24-Oct	18	Semicondutores	19	Semicondutores	27-Oct	ENTREGA 3
31-Oct	20	Junção PN - Criação Jogos	21	Junção PN	03-Nov	
7/11	22	Magnetismo	23	Magnetismo	10-Nov	
14/11	Feriado	Dia - República. Não haverá aula.	24	Projeto - Escolha do Tema / Oficina - Infográfico	17-Nov	
21/11	25	Supercondutividade	26	Supercondutividade	24-Nov	
28/11	27	Nanotecnologia	27	Materiais quânticos	01-Dec	PROJETO
05-Dec	29	PROJETO - Acompanhamento	30	Projeto - Acompanhamento	08-Dec	
12-Dec	31	PROJETO	32	PROJETO	15-Dec	

Material baseado no:

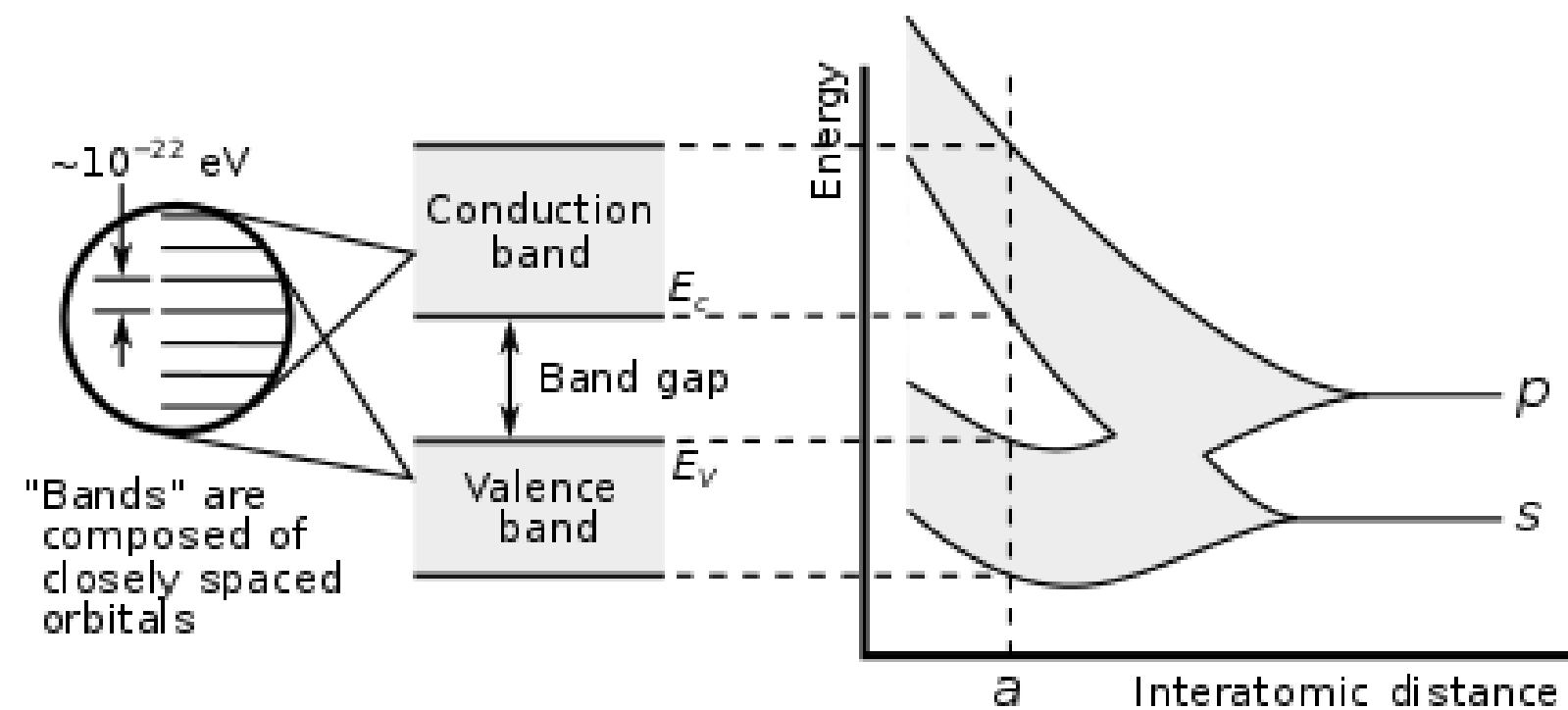
Capítulo 7 do Kittel (Introduction to Solid State Physics – 8ª edição)

Capítulos 7 e 8 do Rosenberg (The Solid State – 3ª edição)

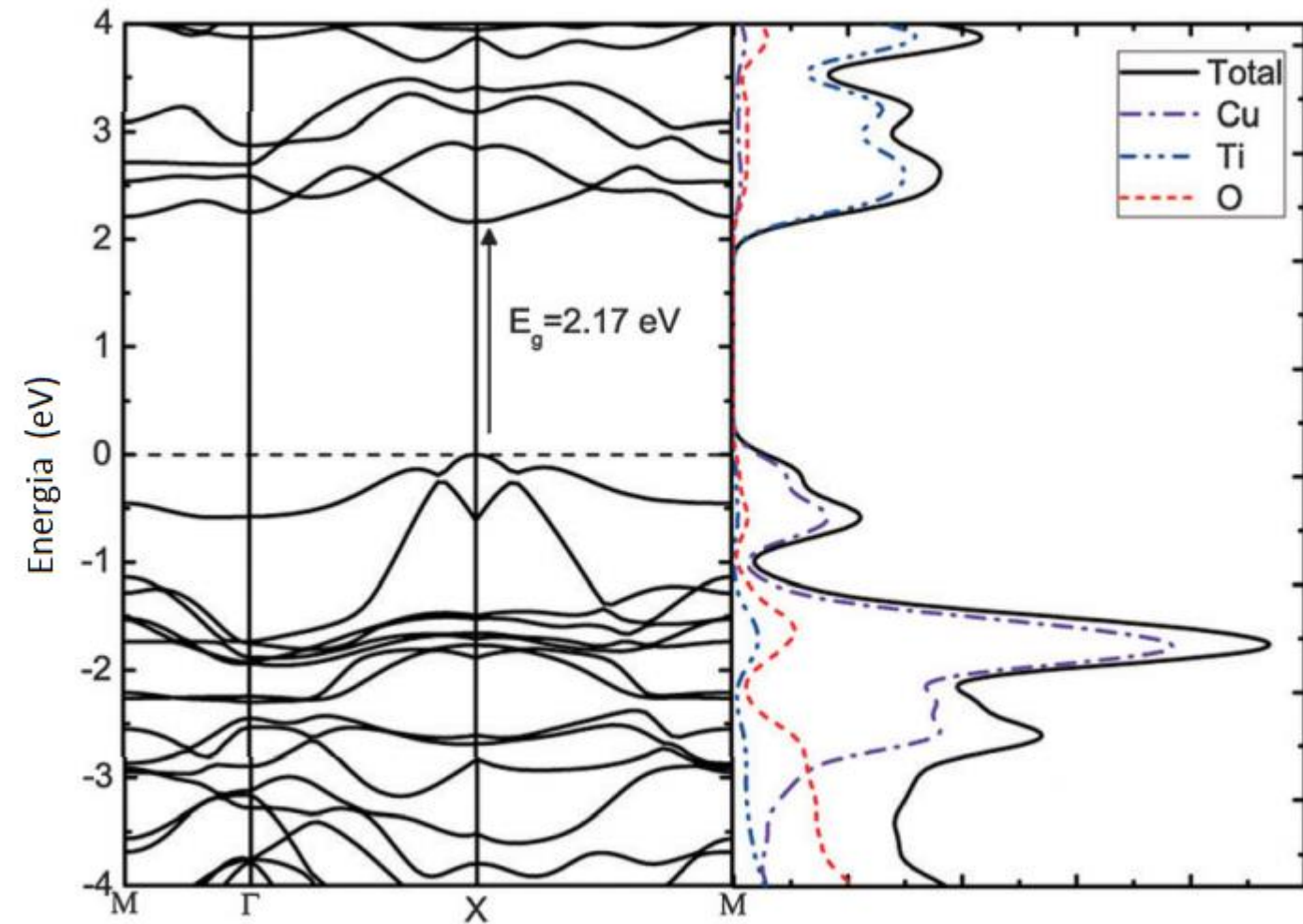
Capítulo 10 – Física Moderna – Paul A. Tipler & Ralph A. Llewellyn

Teoria de bandas

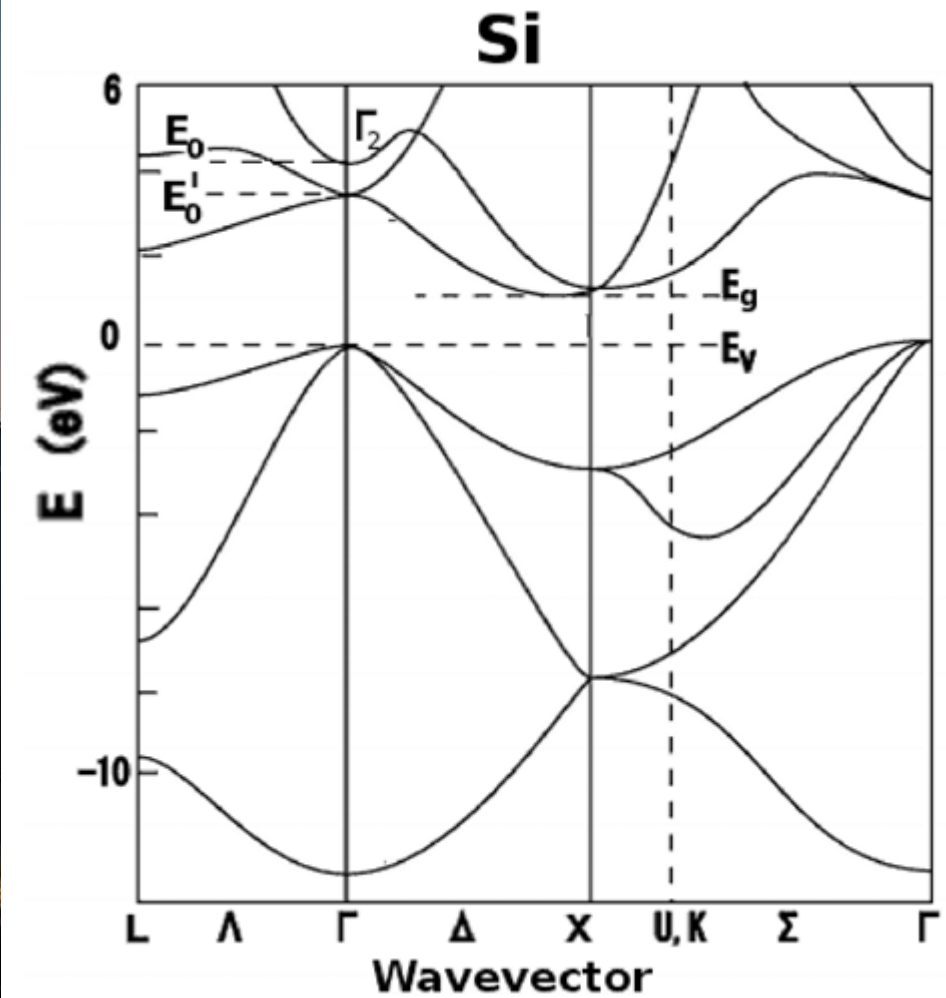
- & As bandas dependem de quanto os elétrons interagem, da quantidade de elétrons, e distância interatômica
- & Existem regiões de energia proibidas



Estrutura de bandas do $(\text{TiO})_x(\text{CuO})_y$



Vista do Jaraguá – Belvedere – Morro da Coruja



Teoria de bandas

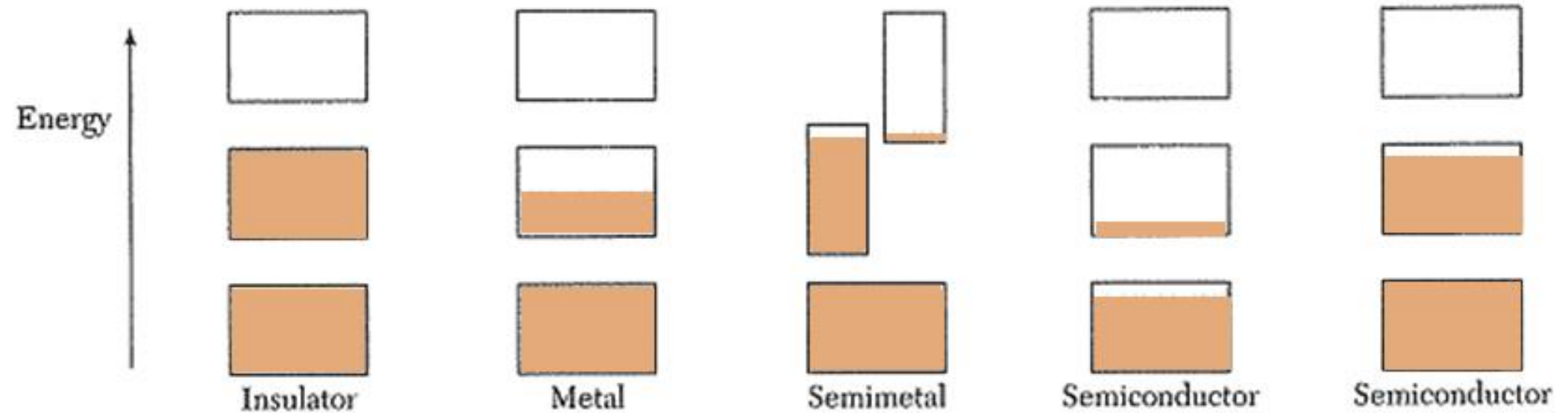
Sucessos do modelo do elétron livre:

$C, \kappa, \sigma, \chi, \dots$

Modelo de Bandas

Falhas do modelo do elétron livre:

- Distinção entre metais, semimetais, semicondutores e isolantes
- Valores positivos do coeficiente Hall
- Relação entre elétrons de valência e condução
- Magnetotransporte



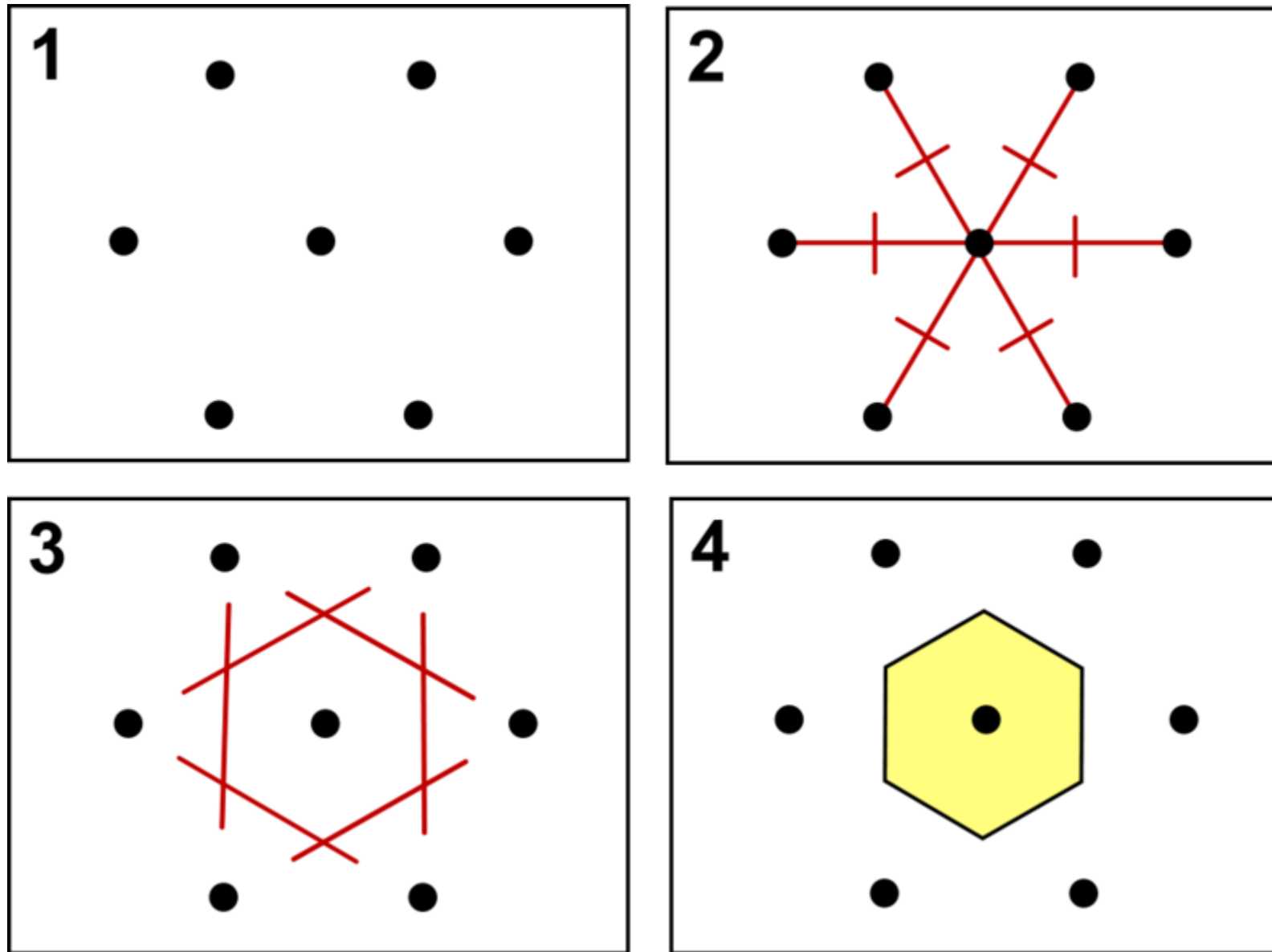
Novos conceitos:

- Massa efetiva
- Buracos

T finito

impurezas

Célula de Wigner Seitz



A escolha da célula primitiva não é única
A célula de Wigner-Seitz é uma célula primitiva especial e única.

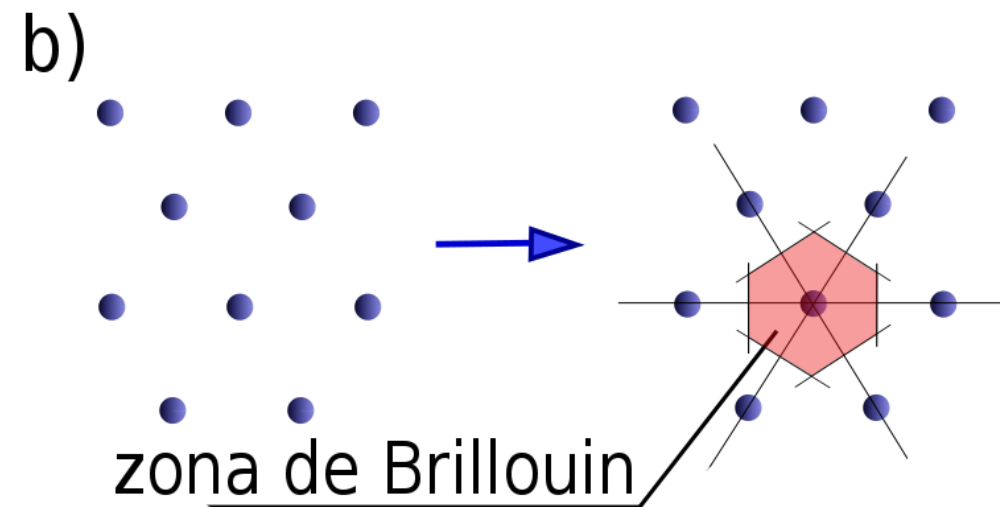
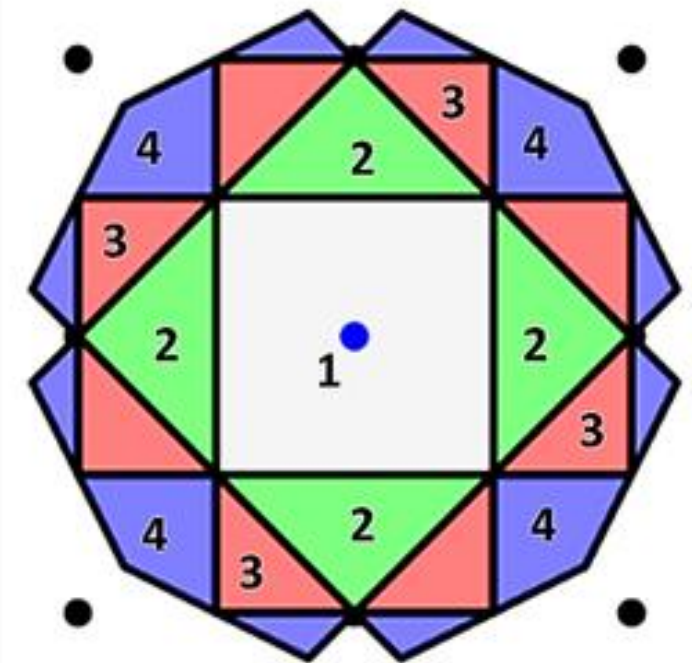
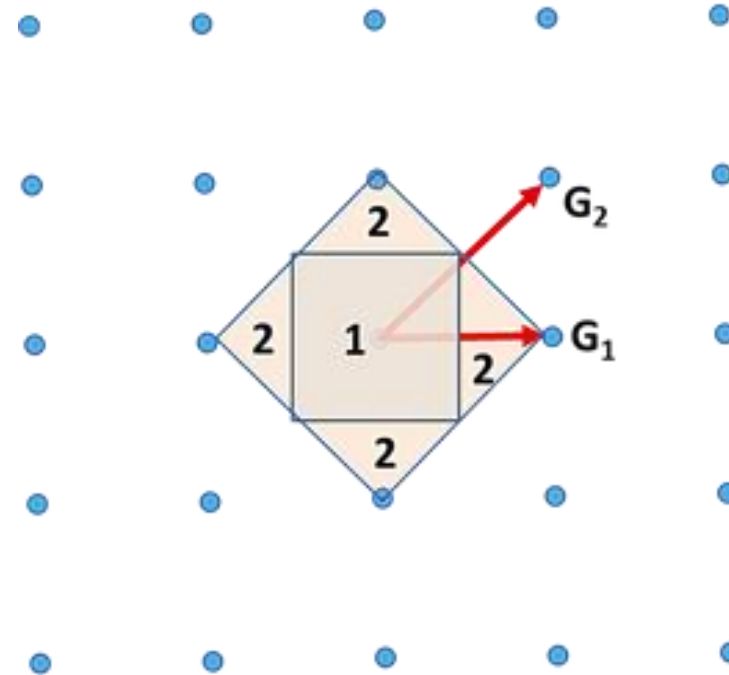
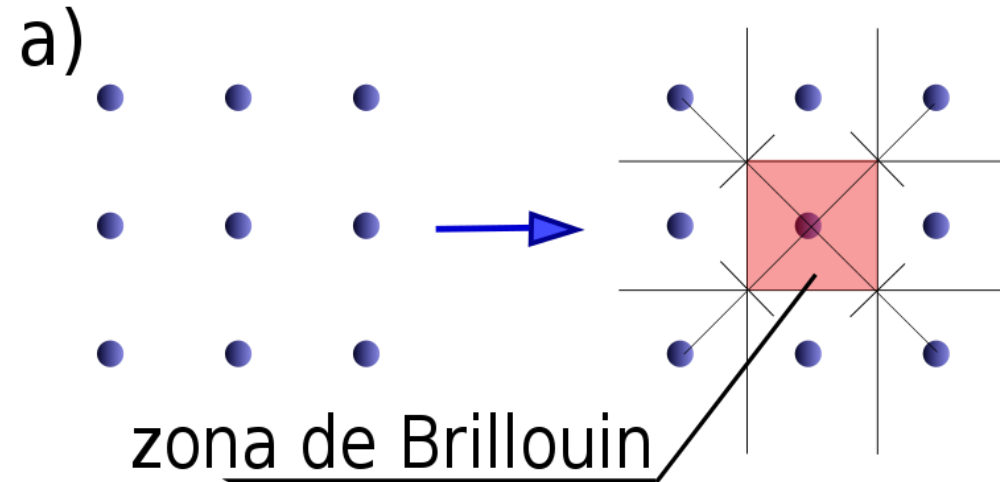
- Procedimento:

(1) Desenhe linhas para conectar um dado ponto de rede para todas as proximidades pontos de rede

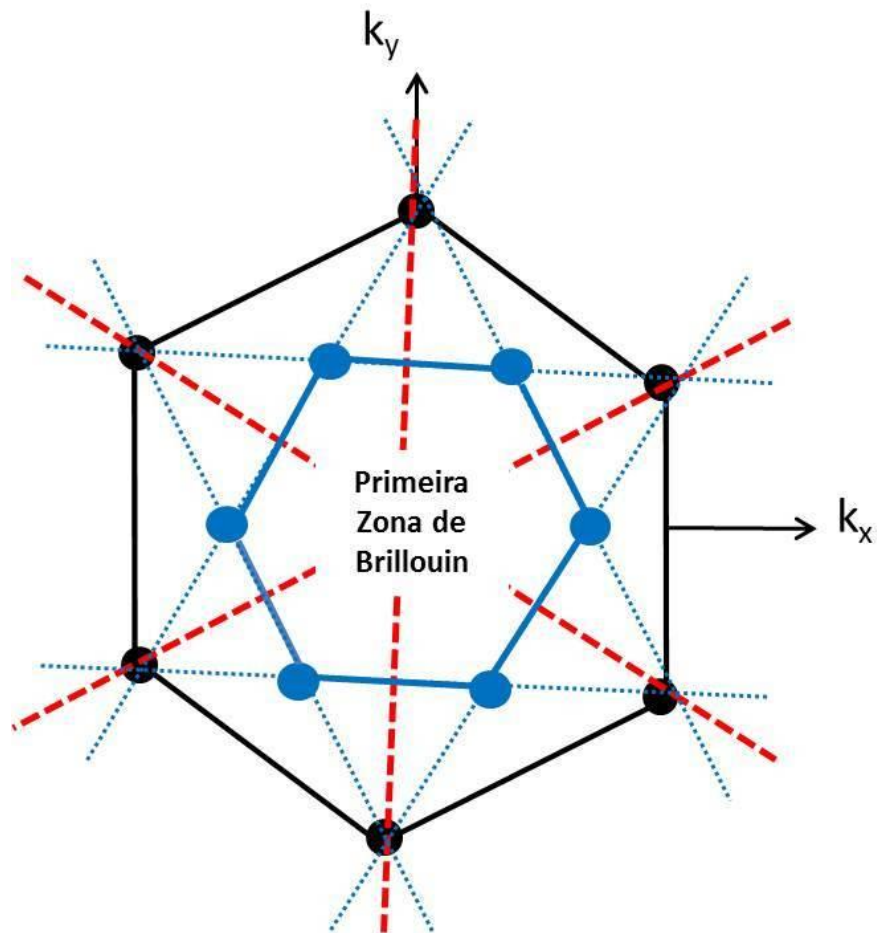
(2) No ponto médio e normal a essas linhas, desenhe novas linhas de planos

(3) O menor volume fechado desta forma é a Célula primitiva de Wigner-Seitz

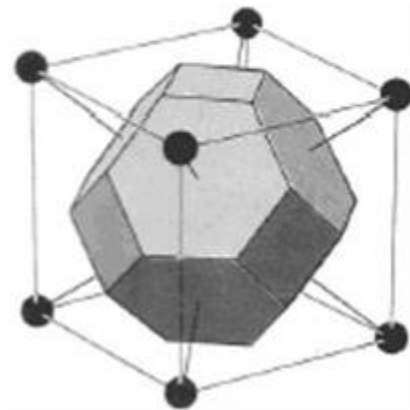
Zona de Brillouin



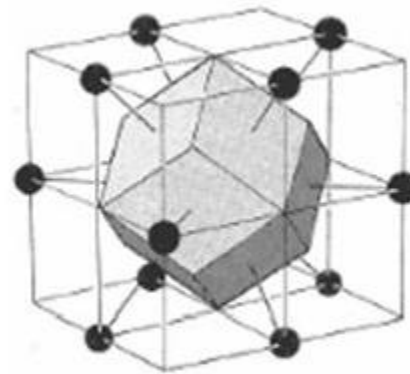
Zona de Brillouin



Espaço direto

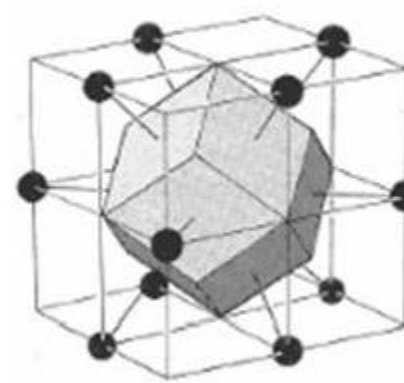


Célula de Wigner-Seitz de uma BCC

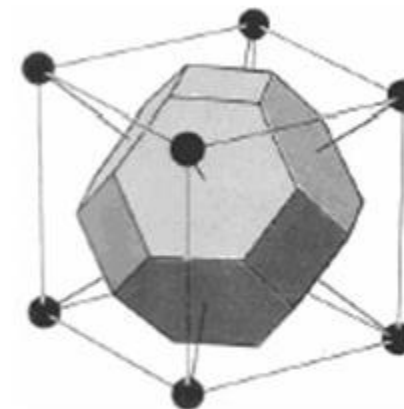


Célula de Wigner-Seitz de uma FCC

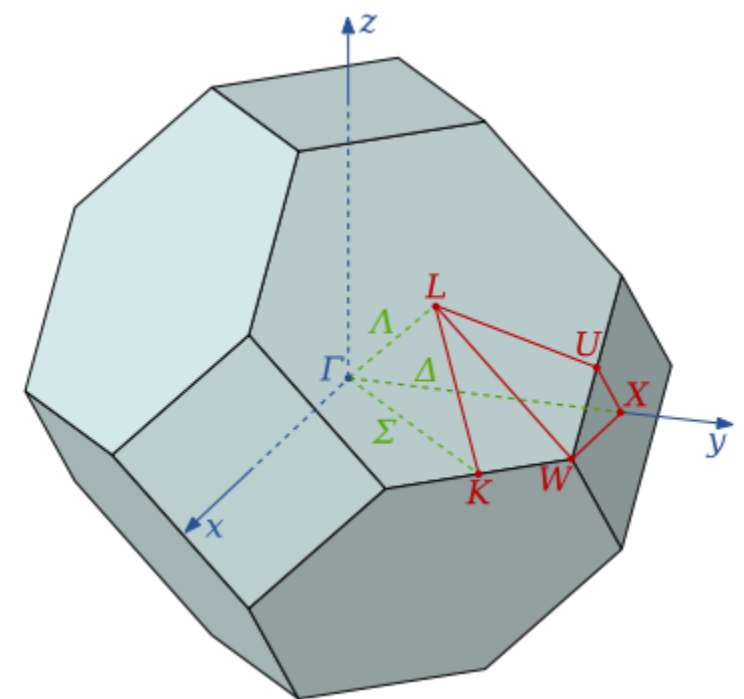
Espaço recíproco



Zona de Brillouin BCC

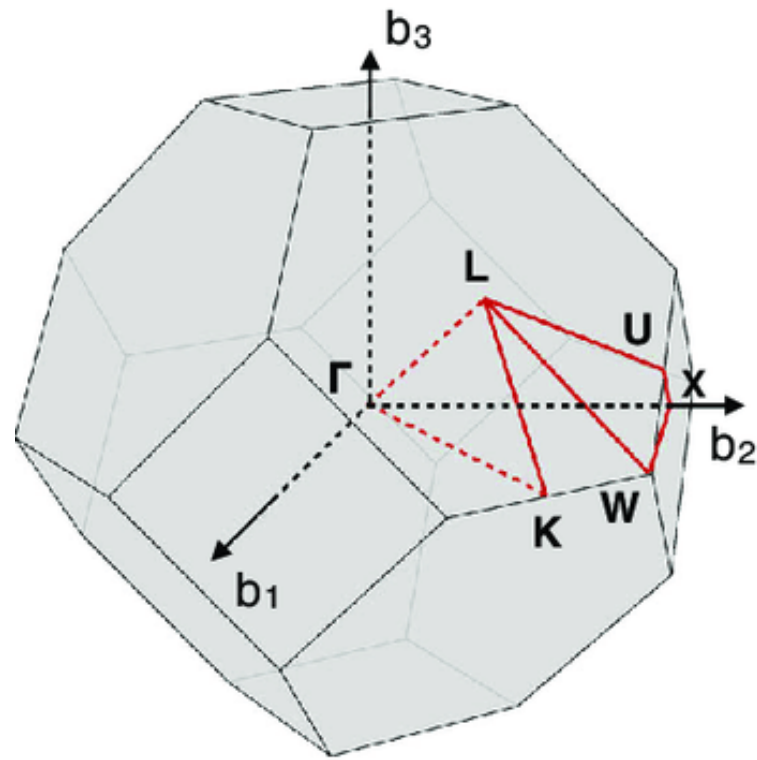


Zona de Brillouin FCC

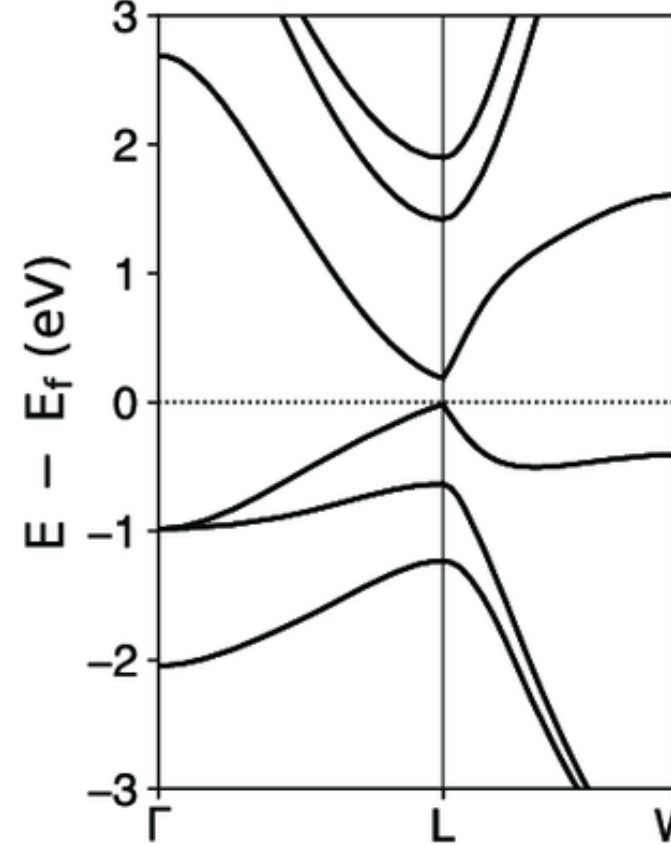


Pontos de alta simetria

(a)

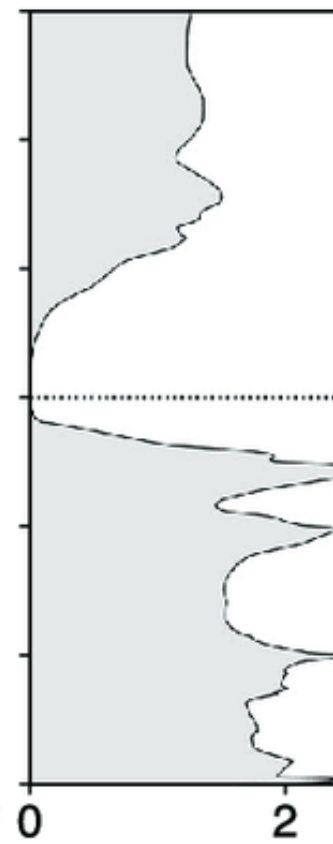


(b)



(c)

DOS



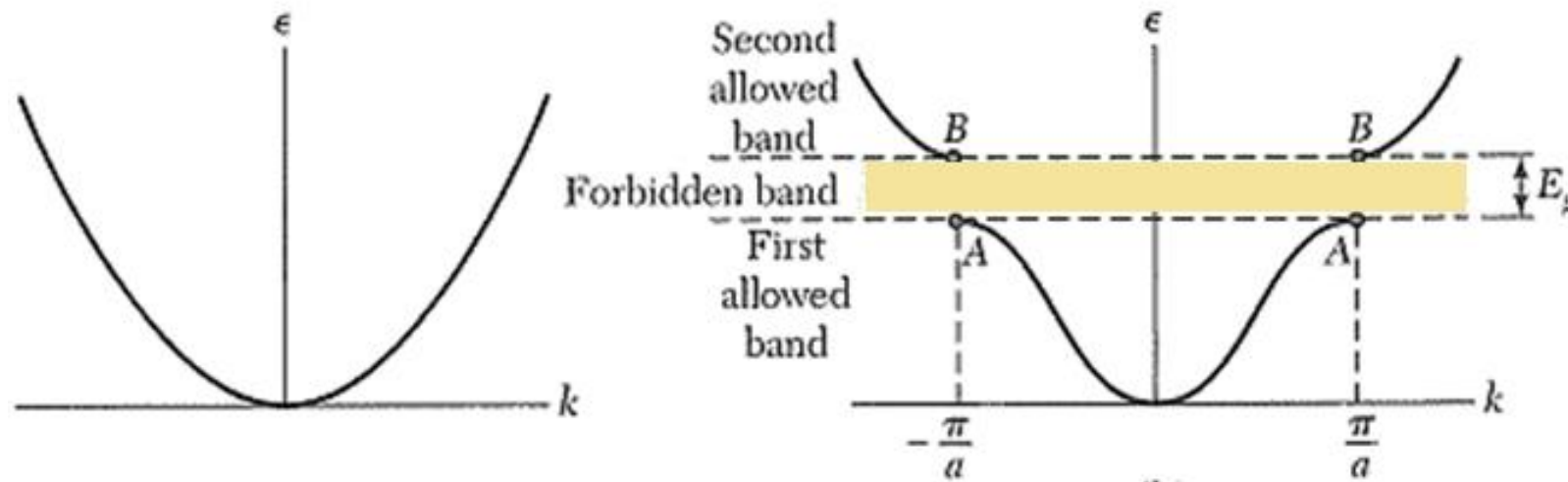
$$\vec{k} = u\vec{b}_1 + v\vec{b}_2 + w\vec{b}_3 \quad : (u, v, w)$$

Symmetry points (u,v,w)	$[k_x, k_y, k_z]$	Point group
$\Gamma: (0,0,0)$	$[0,0,0]$	m3m
$X: (0,1/2,1/2)$	$[0,2\pi/a,0]$	4/mmm
$L: (1/2,1/2,1/2)$	$[\pi/a,\pi/a,\pi/a]$	$\bar{3}m$
$W: (1/4,3/4,1/2)$	$[\pi/a,2\pi/a,0]$	$\bar{4}2m$
$U: (1/4,5/8,5/8)$	$[\pi/2a,2\pi/a,\pi/2a]$	mm2
$K: (3/8,3/4,3/8)$	$[3\pi/2a,3\pi/2a,0]$	mm2

$$\overline{\Gamma L} = \frac{\sqrt{3}\pi}{a}, \quad \overline{\Gamma X} = \frac{2\pi}{a}, \quad \overline{\Gamma W} = \frac{\sqrt{5}\pi}{a}$$

Modelo do Elétron quase livre

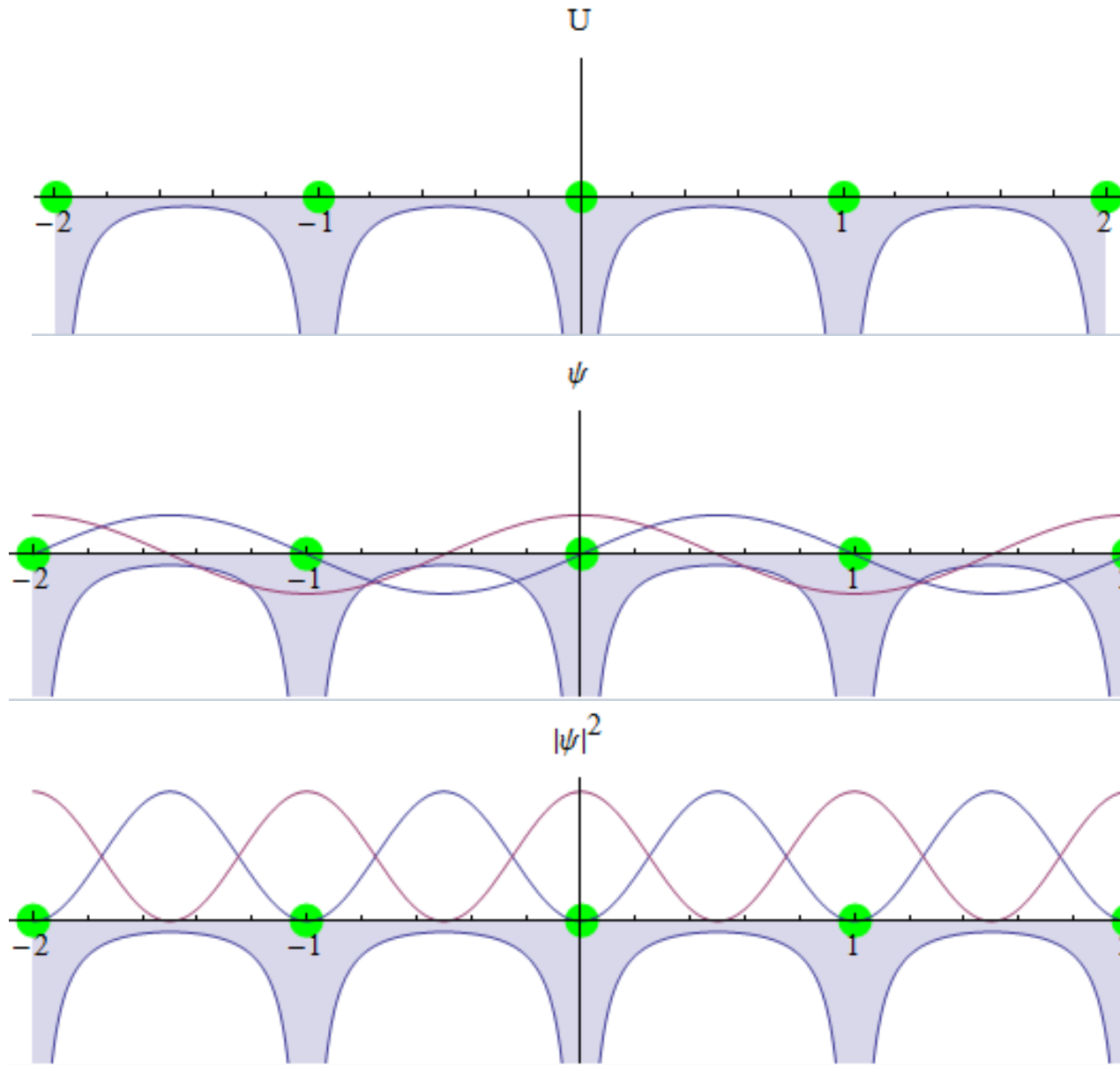
Reflexão de Bragg → soluções do tipo “no wave-like” → gap de energia



Condição de Bragg : $(\mathbf{k} \pm \mathbf{G})^2 = \mathbf{k}^2 \rightarrow (2\mathbf{k} \pm \mathbf{G}) \cdot \mathbf{G} = 0 \quad \mathbf{k} = \mp \frac{1}{2} \mathbf{G}$

$$\psi(\pm) = e^{i\pi x/a} \pm e^{-i\pi x/a} = \begin{cases} 2 \cos(\pi x/a) \\ 2i \sin(\pi x/a) \end{cases} \quad k = \mp \frac{\pi}{a}$$

Origem do gap de energia



$$U(x) = U \cos(2\pi x / a)$$

$$\psi(\pm) = \begin{cases} 2 \cos(\pi x / a) \\ 2i \sin(\pi x / a) \end{cases}$$

$$\rho(\pm) = \begin{cases} 4 \cos^2(\pi x / a) \\ 4 \sin^2(\pi x / a) \end{cases}$$

$$E_+ < E_-$$

$$E_g \simeq \int_0^a dx U(x) [|\psi(-)|^2 - |\psi(+)|^2] = -4U \int_0^a dx \cos^2(2\pi x / a) = -U \geq 0$$

Funções de Bloch

Potential periódico $\rightarrow$ Simetria Translacional $\rightarrow$ Grupo Abelian $T = \{T(\mathbf{R}_l)\}$

$$T(\mathbf{R})\mathbf{r} \equiv \mathbf{r} + \mathbf{R} \qquad T(\mathbf{R})f(\mathbf{r}) \equiv f(T(\mathbf{R})^{-1}\mathbf{r}) = f(\mathbf{r} - \mathbf{R})$$

$\mathbf{k}$ -representação no espaço $T(\mathbf{R}_l)$ é $e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_l}$ Base = $e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$

As funções base correspondents para equação de Schrodinger deve satisfazer:

$$T(\mathbf{R}_l)\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \equiv \psi_{\mathbf{k}}(T(\mathbf{R}_l)^{-1}\mathbf{r}) = \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l) = e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_l}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

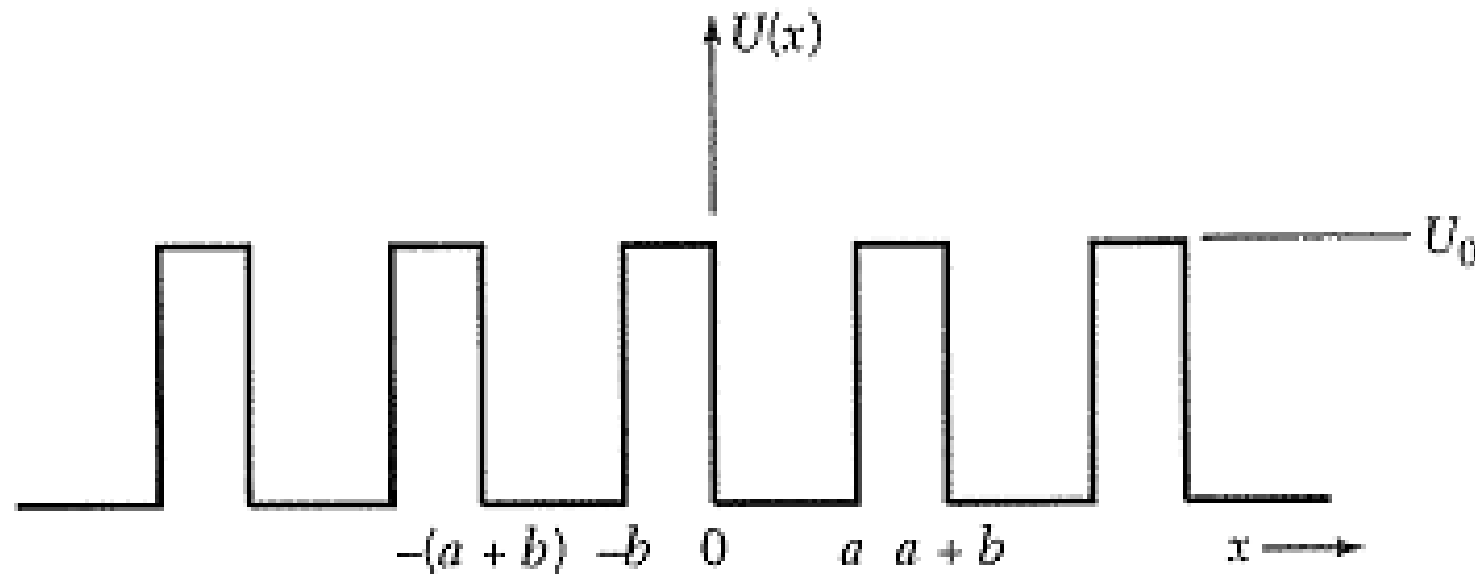
ou $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}_l) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_l}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$

Esta condição pode ser satisfeita pela função de Bloch

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \qquad \text{onde} \qquad u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}_l) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

$e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{R}_l} = 1 \rightarrow$ valores representativos de $\mathbf{k}$ estão contidos dentro da Zona de Brillouin.

Modelo de Kronig-Penney Model



$$U = \begin{cases} 0 & n(a+b) < x < n(a+b)+a \\ U_0 & n(a+b)+a < x < (n+1)(a+b) \end{cases}$$

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2 K^2}{2m}$$

$$0 < x < a \quad U = 0 \quad \psi = Ae^{iKx} + Be^{-iKx}$$

$$-b < x < 0 \quad U = U_0 \quad \psi = Ce^{Qx} + De^{-Qx} \quad U_0 - \varepsilon = \frac{\hbar^2 Q^2}{2m}$$

Modelo de Kronig-Penney Model

Teorema de Bloch: $\psi(a < x < a+b) = \psi(-b < x < 0) e^{ik(a+b)}$

$\psi(0)$ continua: $A + B = C + D$

$\psi(a)$ continua: $Ae^{iKa} + Be^{-iKa} = \psi(-b) e^{ik(a+b)} = (Ce^{-Qb} + De^{Qb}) e^{ik(a+b)}$

$\psi'(0)$ continua: $iKA - iKB = QC - QD$

$\psi'(a)$ continua: $iKAe^{iKa} - iKBe^{-iKa} = \psi'(-b) e^{ik(a+b)} = (QCe^{-Qb} - QDe^{Qb}) e^{ik(a+b)}$

Modelo de Kronig-Penney Model

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ e^{iKa} & e^{-iKa} & -e^{-Qb+ik(a+b)} & -e^{Qb+ik(a+b)} \\ iK & -iK & -Q & Q \\ iKe^{iKa} & -iKe^{-iKa} & -Qe^{-Qb+ik(a+b)} & Qe^{Qb+ik(a+b)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \\ C \\ D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$
$$\rightarrow \frac{Q^2 - K^2}{2QK} \sinh Qb \sin Ka + \cosh Qb \cos Ka = \cos k(a+b)$$

Função potencial Delta: $b = 0, \quad U_0 = \infty \quad \text{tal qual} \quad \frac{1}{2}Q^2ba = P = \text{finito}$

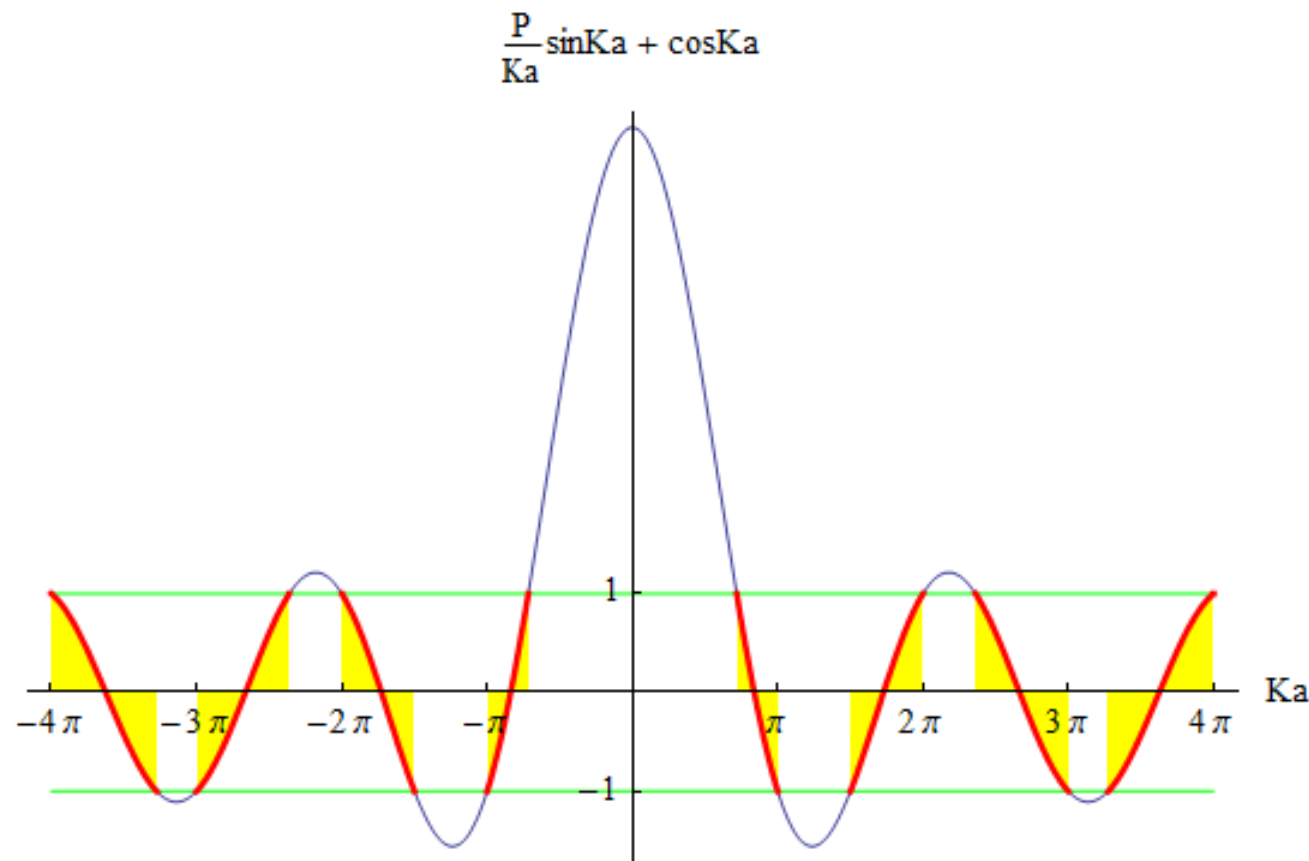
De modo que $Q \gg K, \quad Qb \ll 1$ Assim:

$$\frac{P}{Ka} \sin Ka + \cos Ka = \cos ka$$

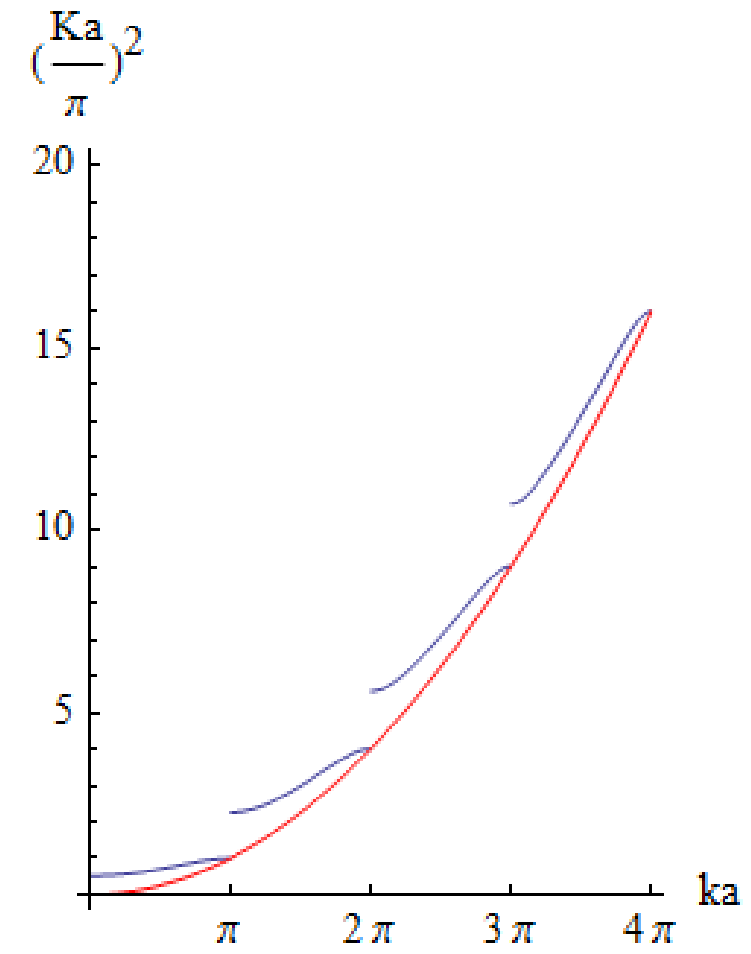
Modelo de Kronig-Penney Model

$$\frac{P}{Ka} \sin Ka + \cos Ka = \cos ka$$

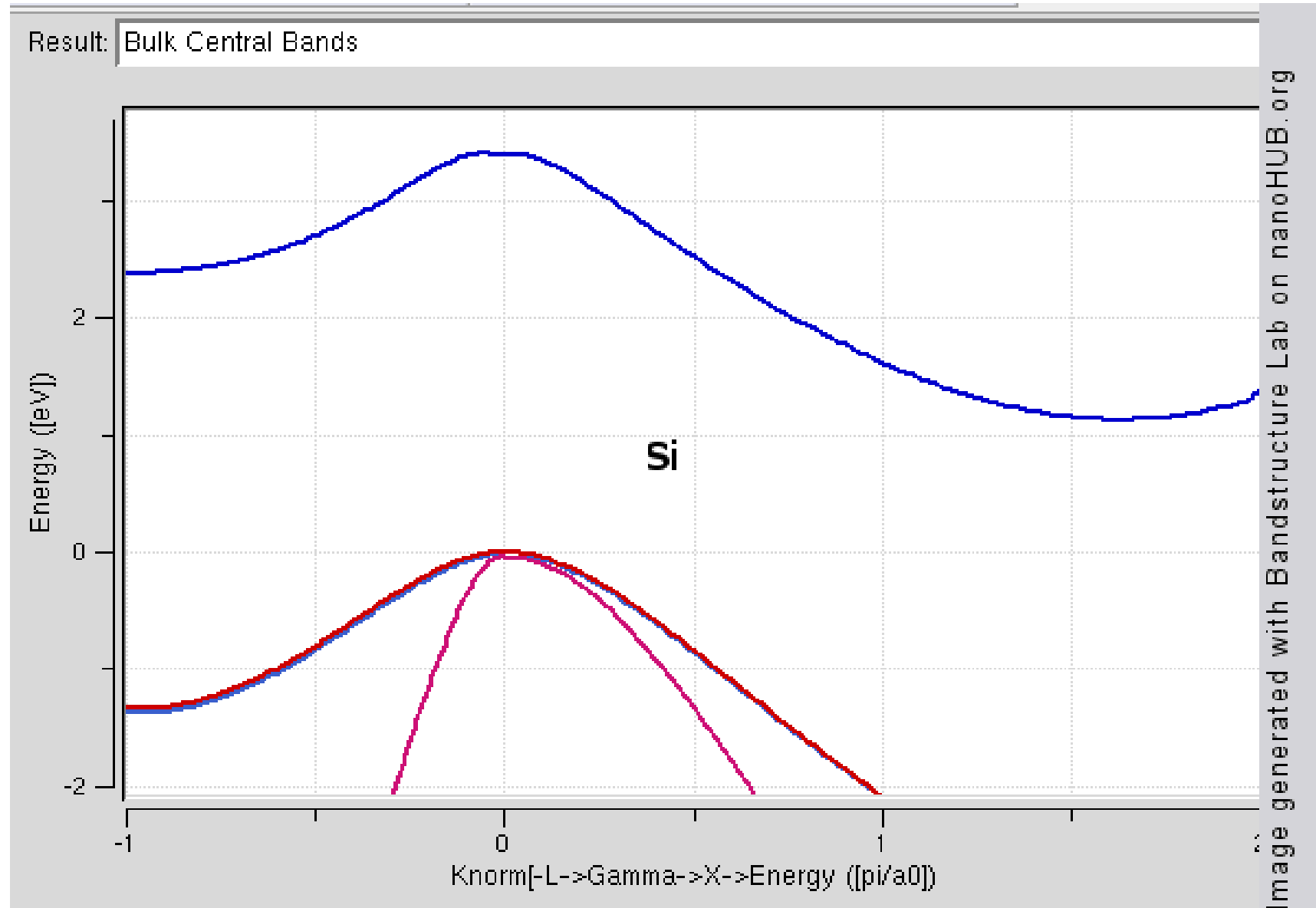
$$\left(\varepsilon = \frac{\hbar^2 K^2}{2m} \text{ em unidades de } \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \right) = \left(\frac{Ka}{\pi} \right)^2$$



$$P = \frac{3\pi}{2}$$

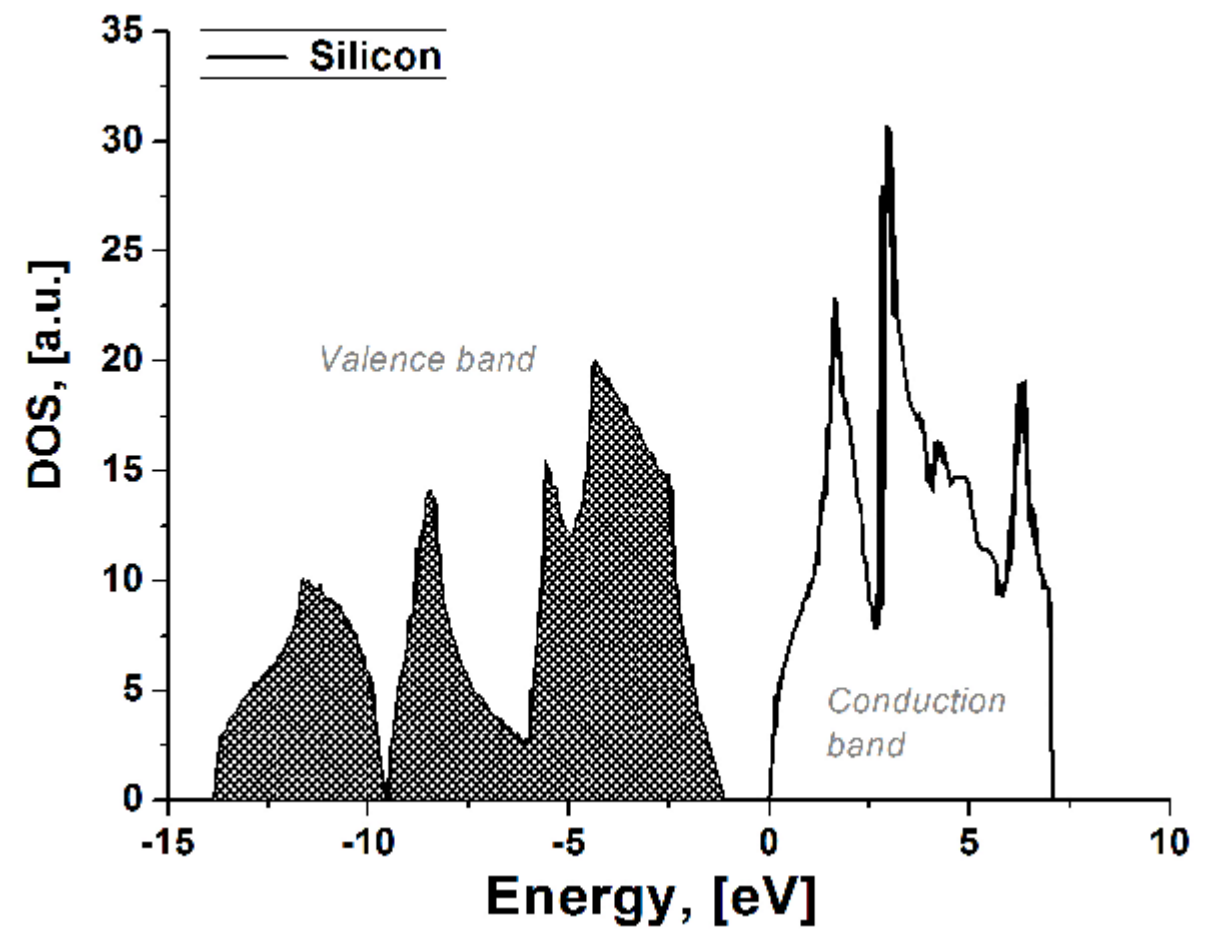
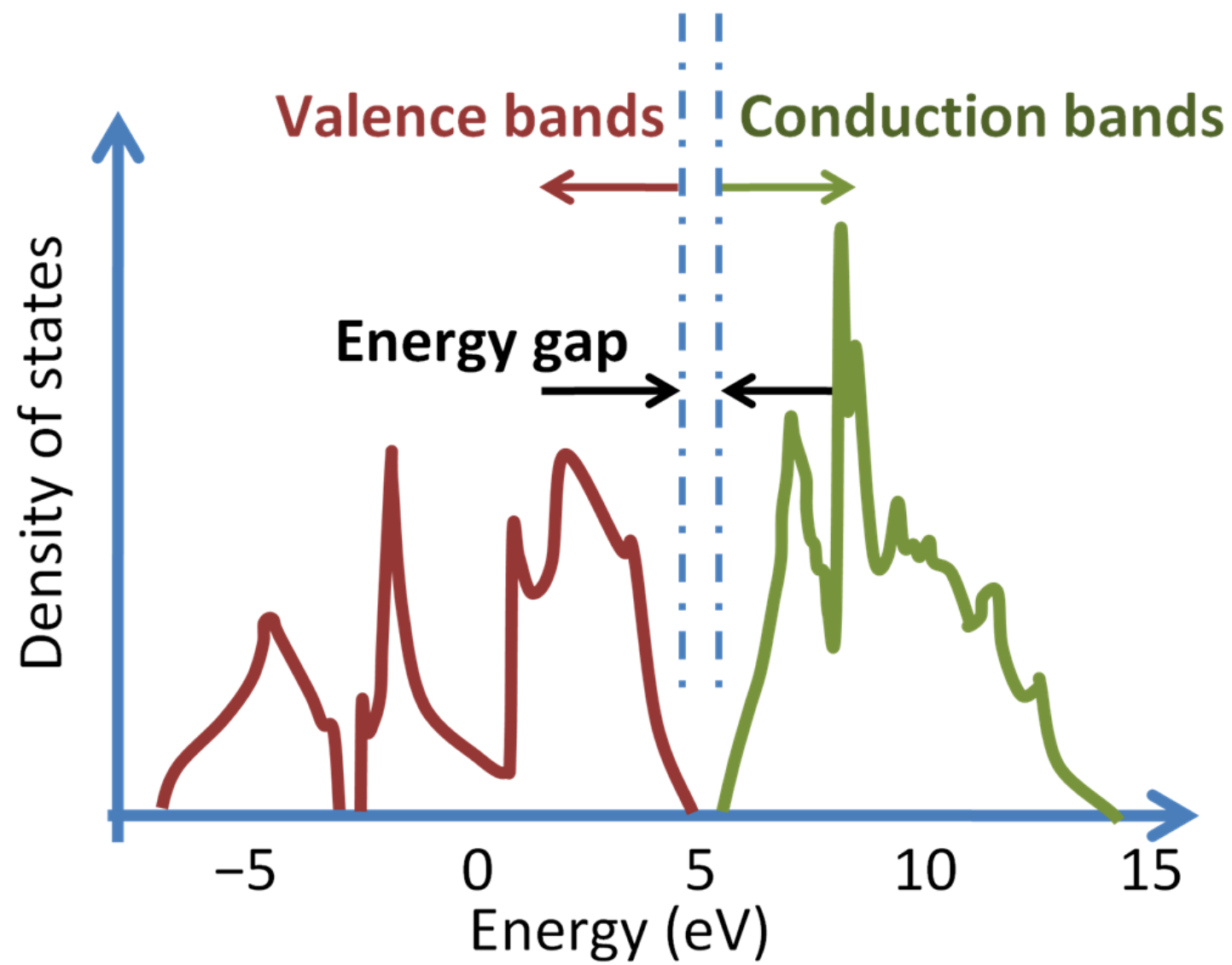


Estruturas de bandas típicas de semicondutores



Massa efetiva: $\frac{1}{m^*} \equiv \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 \varepsilon}{dk^2}$

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Rightarrow \frac{d\varepsilon}{dk} = \frac{\hbar^2 k}{m} \Rightarrow \frac{d^2 \varepsilon}{dk^2} = \frac{\hbar^2}{m}$$



Atividade – 20/10/2022

Propor uma situação-problema e questionamentos quanto:

- 1) A classificação dos materiais sólidos quanto à condutividade,
- 2) Características básicas dos materiais semicondutores,
- 3) O modelo de estrutura de bandas de energia,

Atividade – 20/10/2022

Sequência didática sobre teoria de bandas, utilizando os Três Momentos Pedagógicos (3MP)

Problematização Inicial: apresentam-se questões ou situações reais que os alunos conhecem e presenciam e que estão envolvidas nos temas. Nesse momento pedagógico, os alunos são desafiados a expor o que pensam sobre as situações, a fim de que o professor possa ir conhecendo o que eles pensam. Para os autores, a finalidade desse momento é propiciar um distanciamento crítico do aluno ao se defrontar com as interpretações das situações propostas para discussão e fazer com que ele sinta a necessidade da aquisição de outros conhecimentos que ainda não detém. **Organização do Conhecimento:** momento em que, sob a orientação do professor, os conhecimentos necessários para a compreensão dos temas e da problematização inicial são estudados; **Aplicação do Conhecimento:** momento que se destina a abordar sistematicamente o conhecimento incorporado pelo aluno, para analisar e interpretar tanto as situações iniciais que determinaram seu estudo quanto outras que, embora não estejam diretamente ligadas ao momento inicial, possam ser compreendidas pelo mesmo conhecimento (MUENCHEN E DELIZOICOV, 2012).