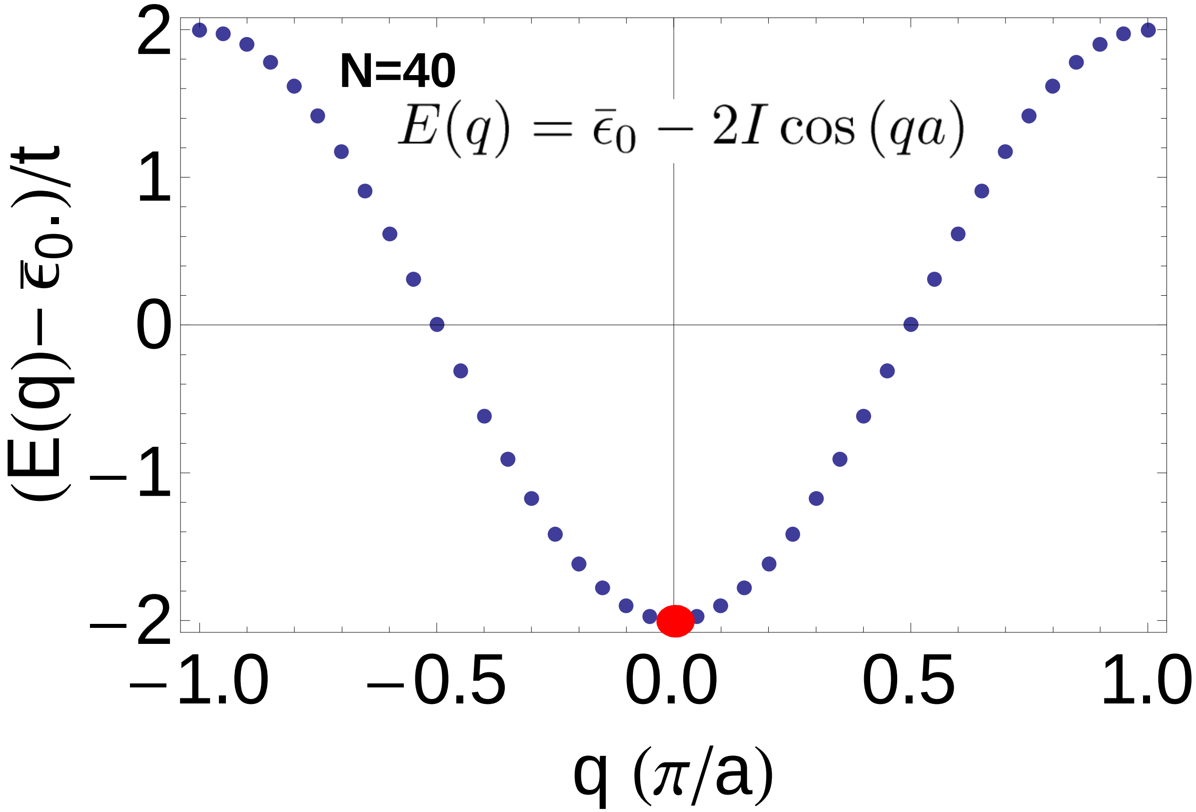
Um elétron na banda + campo elétrico

Banda com apenas 1 e-



- Velocidade e massa efetiva:

$$v = \frac{1}{\hbar}\frac{dE(q)}{dq} = \frac{2Ia}{\hbar}\sin(qa)$$

$$m^*(q) = \hbar^2\left(\frac{d^2E(q)}{dq^2}\right)^{-1} = \frac{\hbar^2}{2Ia^2}\frac{1}{\cos(qa)}$$

- Força devido a um campo elétrico:

$$f = \hbar\frac{dq}{dt} = -eE \Rightarrow q(t) = q_0 - \frac{eE}{\hbar}t$$

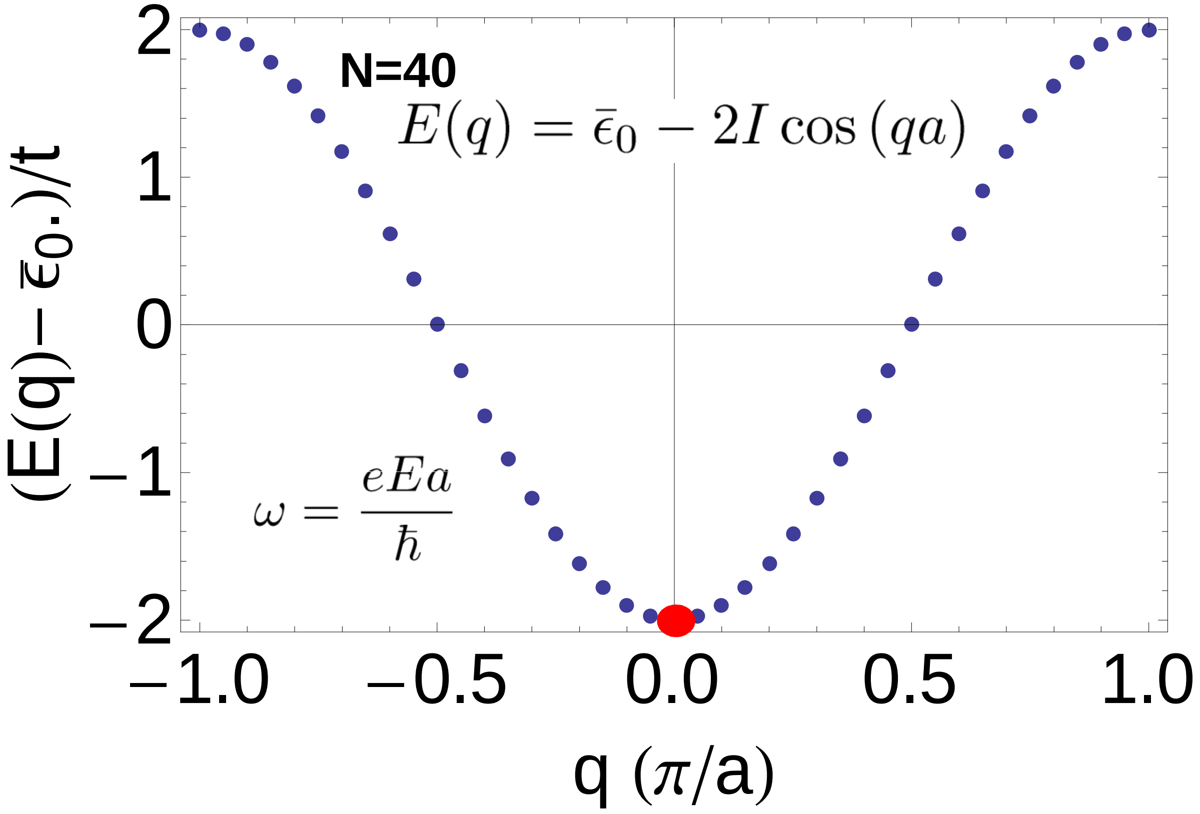
- “2a Lei” : $f = -eE = m^*(q)\dfrac{dv(q)}{dt}$

- Elétron inicialmente em q_0=0:

$$v(t) = -\frac{2Ia}{\hbar}\sin(\omega t) \qquad m^*(t) = \frac{\hbar^2}{2Ia^2}\left[\cos(\omega t)\right]^{-1} \qquad \omega = \frac{eEa}{\hbar}$$

Um elétron na banda + campo elétrico

Banda com apenas 1 e-



- Oscilações de Bloch:

$$x(t) - x_0 = \int_0^t v(t')dt' = \frac{2I}{eE}\left[\cos(\omega t) - 1\right]$$

- Velocidade de grupo oscila:

$$v(t) = -\frac{2Ia}{\hbar}\sin(\omega t)$$

- Massa efetiva *diverge* para:

$$q(t) = (2n+1)\frac{\pi}{2a}$$

- Note que a corrente líquida é zero:

$$J = -en\langle v(t)\rangle = 0$$

Material apenas com elétrons livres em uma banda se comportam como um *isolante.* (!!!)

Para termos correntes, é necessário algum tipo de espalhamento.

Condutividades elétrica e térmica.

- Aproximação de tempo de relaxação: $$\frac{d\langle v\rangle}{dt} = -\frac{\langle v\rangle}{\tau} + \frac{(-e)E}{m^*}$$
- Condutividade elétrica : $J = (-e)n\langle v\rangle = \sigma E$

$$\boxed{\sigma = \frac{ne^2\tau}{m^*}}$$

Drude ou Sommerfeld (L1)

- Condutividade térmica : $J_Q = -\kappa \nabla T(\mathbf{r})$
- Teoria cinética (semi-clássica): $\kappa = \frac{1}{3}\langle v^2\rangle \tau C_v(T)$

$$\boxed{\kappa = \frac{1}{6} n\pi^2 k_B^2 \frac{T}{\varepsilon_F} v_F^2 \tau}$$

Sommerfeld (L4)

- Lei de Wiedmann-Franz: $L = \frac{\kappa}{\sigma T} = \text{constante}$

$$\boxed{L = \frac{\kappa}{\sigma T} = \frac{\pi^2}{3}\frac{k_B^2}{e^2} \equiv L_0}$$

Razão de Wiedmann-Franz

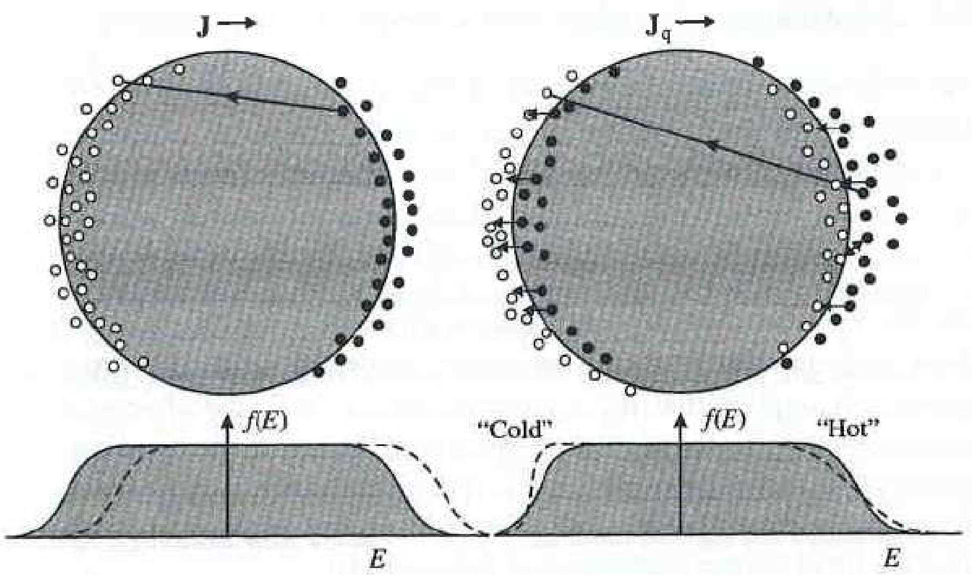
Tempos de relaxação: Regra de Matthiessen.

- Em muitos casos, a razão de Wiedmann-Franz não é compatível com o experimento.

- Tempos de relaxação térmico e elétrico são, em geral, *diferentes*.

$$\sigma = \frac{ne^2\tau_\sigma}{m^*} \qquad \kappa = \frac{1}{6}n\pi^2 k_B^2 \frac{T}{\varepsilon_F} v_F^2 \tau_\kappa$$

pois tem origem em processos microscópicos *distintos.*



τ_σ : tempo característico para randomização da velocidade excedente do elétron.

τ_σ : tempo característico para randomização da energia térmica do elétron.

Regra de Matthiessen.

- Regra de Matthiesen: $$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_1} + \frac{1}{\tau_2} + \frac{1}{\tau_3} \cdots$$

- Assume processos de espalhamento de elétrons independentes entre si:
  - Impurezas (desordem) e centros espalhadores.
  - Fônons (vibrações na rede)
  - Interação elétron-elétron
  - etc.

- Falha quando:
  - τ depende de **k**
  - Os resultado de um processo de espalhamento interfere em outro.

Semicondutores: elétrons e buracos

- Densidade de elétrons (Sommerfeld). $$n = \frac{1}{V_{\mathbf{r}}} \int_0^{\infty} \rho(\varepsilon) f_{\mathrm{D}}(\varepsilon, T, \mu) d\varepsilon$$

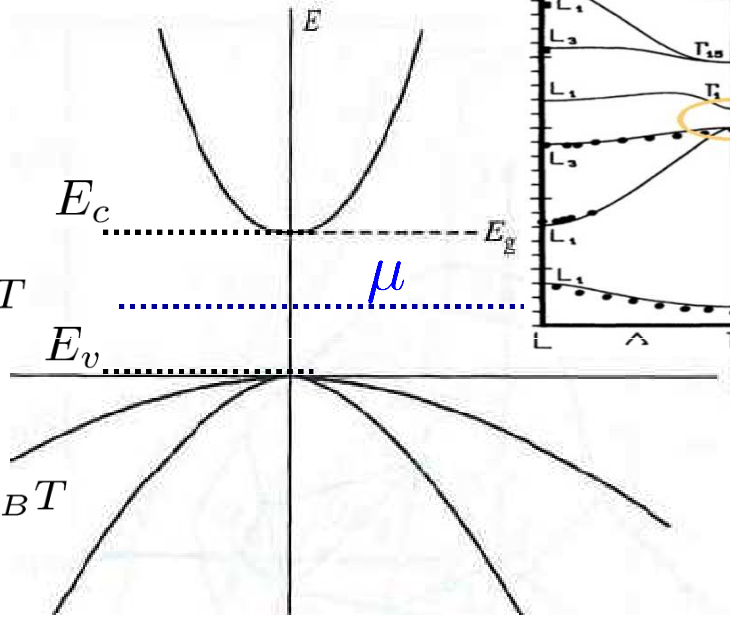
- Distribuição de elétrons e buracos.

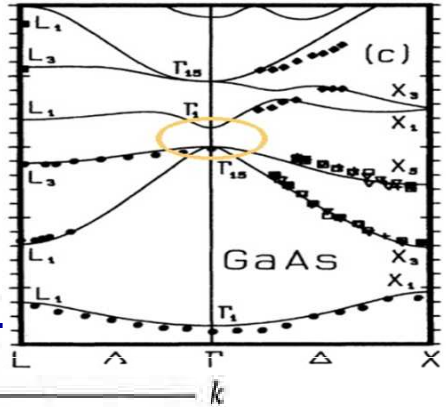
Elétrons na banda de condução (energias acima de μ):

$$\varepsilon - \mu \gg k_B T \Rightarrow f_D^{(c)}(\varepsilon, T, \mu) \approx e^{-(\varepsilon-\mu)/k_B T}$$

Buracos na banda de valência (energias abaixo de μ):

$$\mu - \varepsilon \gg k_B T \Rightarrow 1 - f_D^{(v)}(\varepsilon, T, \mu) \approx e^{-(\mu-\varepsilon)/k_B T}$$





- Densidade de estados de elétrons e buracos

Banda de condução (energias acima de E_c):

$$\rho_c(\varepsilon) = V_{\mathbf{r}} C \left(m_c^*\right)^{\frac{3}{2}} \left(\varepsilon - E_c\right)^{\frac{1}{2}}$$

Banda de valencia (energias abaixo de E_v):

$$\rho_v(\varepsilon) = V_{\mathbf{r}} C \left(m_h^*\right)^{\frac{3}{2}} \left(E_v - \varepsilon\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$C = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}$$

Semicondutores: elétrons e buracos

- Densidade de elétrons de condução e valência.

$$n = \frac{1}{V_{\mathbf{r}}} \int_{E_c}^{\infty} \rho_c(\varepsilon) f_{\mathrm{D}}^{(c)}(\varepsilon, T, \mu) d\varepsilon \qquad (\varepsilon - \mu \gg k_B T) \Rightarrow \quad n = N_c(T) e^{-\frac{E_c - \mu}{k_B T}}$$

$$p = \frac{1}{V_{\mathbf{r}}} \int_{-\infty}^{E_v} \rho_v(\varepsilon) \left[1 - f_{\mathrm{D}}^{(v)}(\varepsilon, T, \mu)\right] d\varepsilon \quad (\mu - \varepsilon \gg k_B T) \Rightarrow \quad p = N_v(T) e^{-\frac{\mu - E_v}{k_B T}}$$

$$N_c(T), N_c(T) \propto T^{\frac{3}{2}}$$ Número de estados por unidade de volume efetivamente acessíveis

- "Lei de Ação das Massas"

$$n.p = N_c N_v e^{-\frac{E_g}{k_B T}} = W T^3 e^{-\frac{E_g}{k_B T}}$$

$$E_g = E_c - E_v$$ Gap do semicondutor