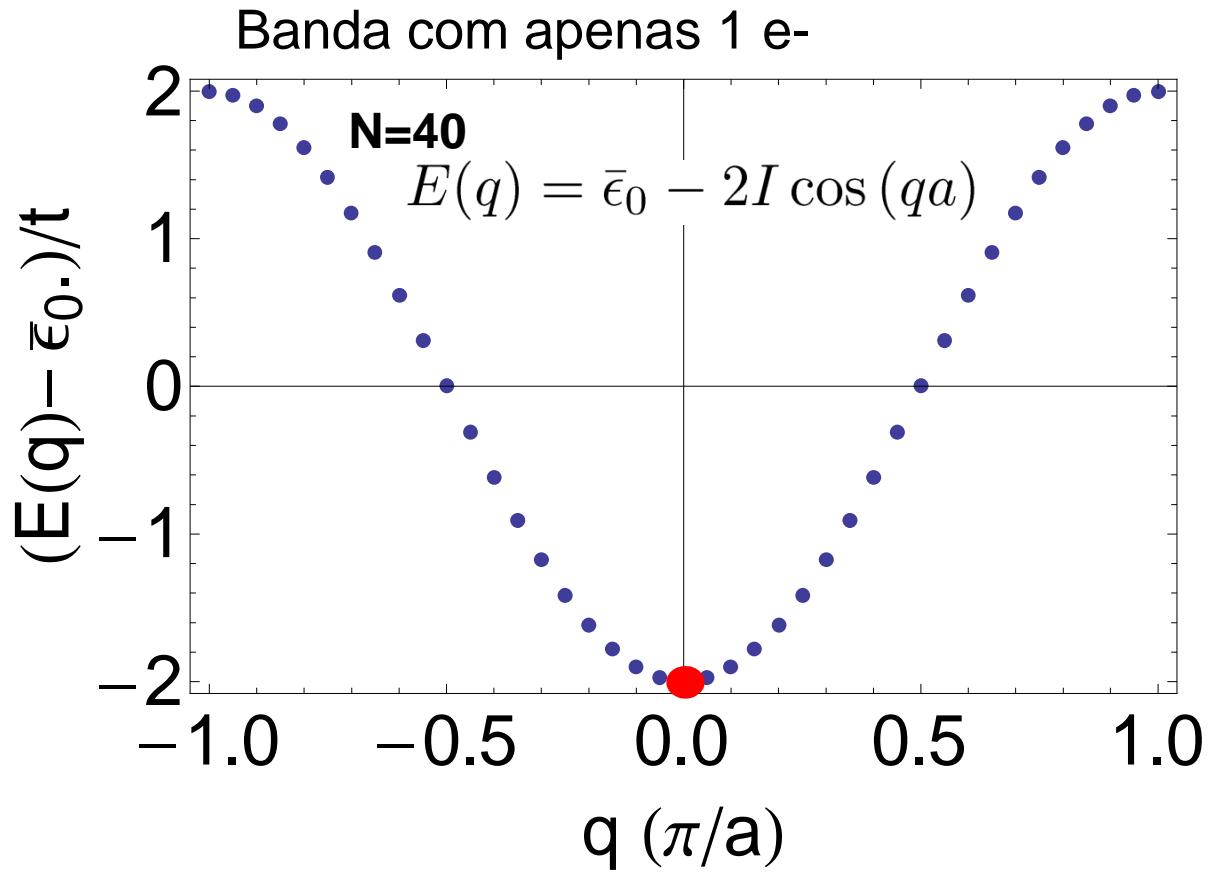


# Um elétron na banda + campo elétrico



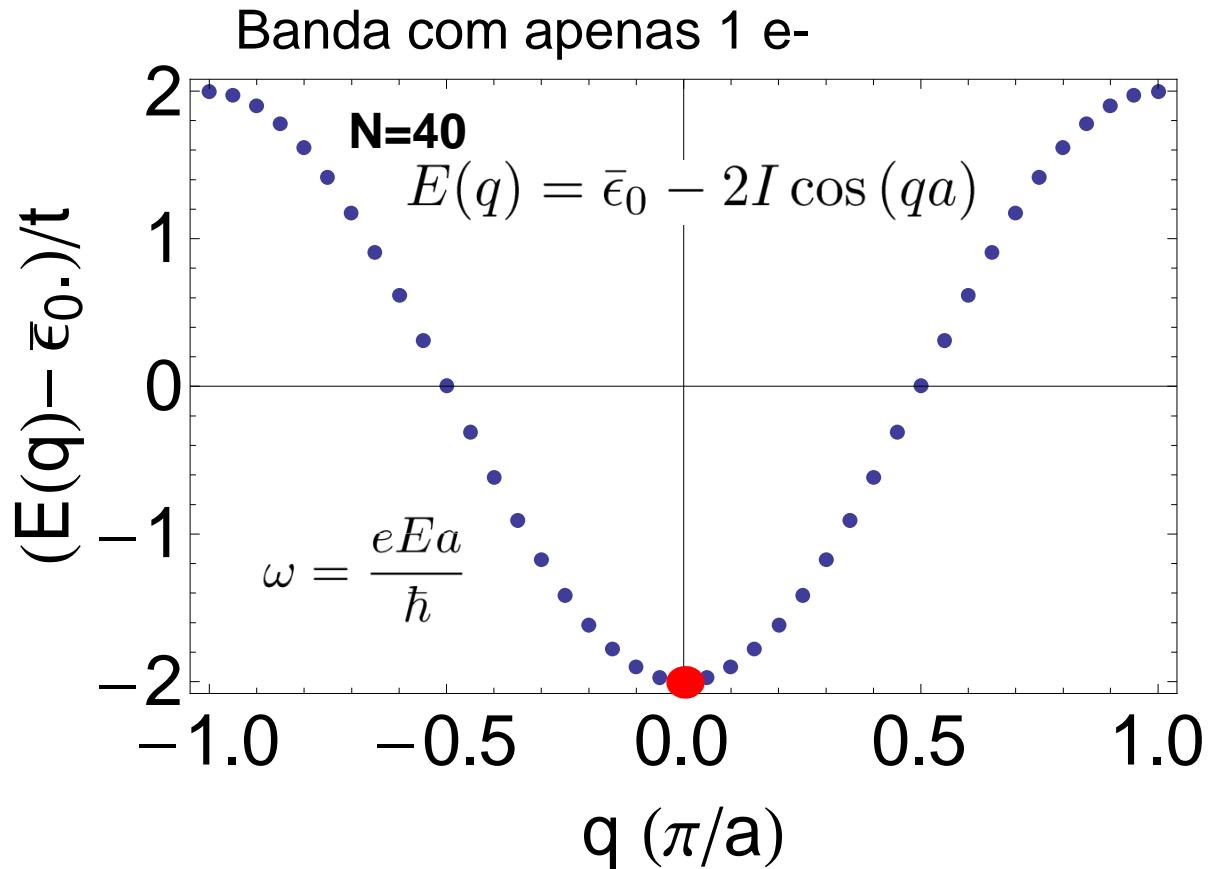
- Elétron inicialmente em  $q_0=0$ :

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

- 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” :  $f = -eE = m^*(q) \frac{dv(q)}{dt}$

$$\omega = \frac{eEa}{\hbar}$$

# Um elétron na banda + campo elétrico



- Oscilações de Bloch:

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

- 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 :  $J = (-e)n\langle v \rangle = \sigma E$

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

- Condutividade térmica :  $J_Q = -\kappa \nabla T(\mathbf{r})$

Drude ou Sommerfeld (L1)

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

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

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

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

“número de Lorentz”

Sommerfeld (L4)

Tarefa 13, parte1 (agora)

Calcule essa constante em  
(Volts/Kelvin)<sup>2</sup>

Dado:

$$k_B = 8.62 \times 10^{-5} \text{ eV/K}$$

# Lei de Wiedmann-Franz.

$$L_0 = \frac{\pi^2}{3} \frac{k_B^2}{e^2} = \boxed{\text{W}\Omega\text{K}^{-2}}$$

“Lorentz number”

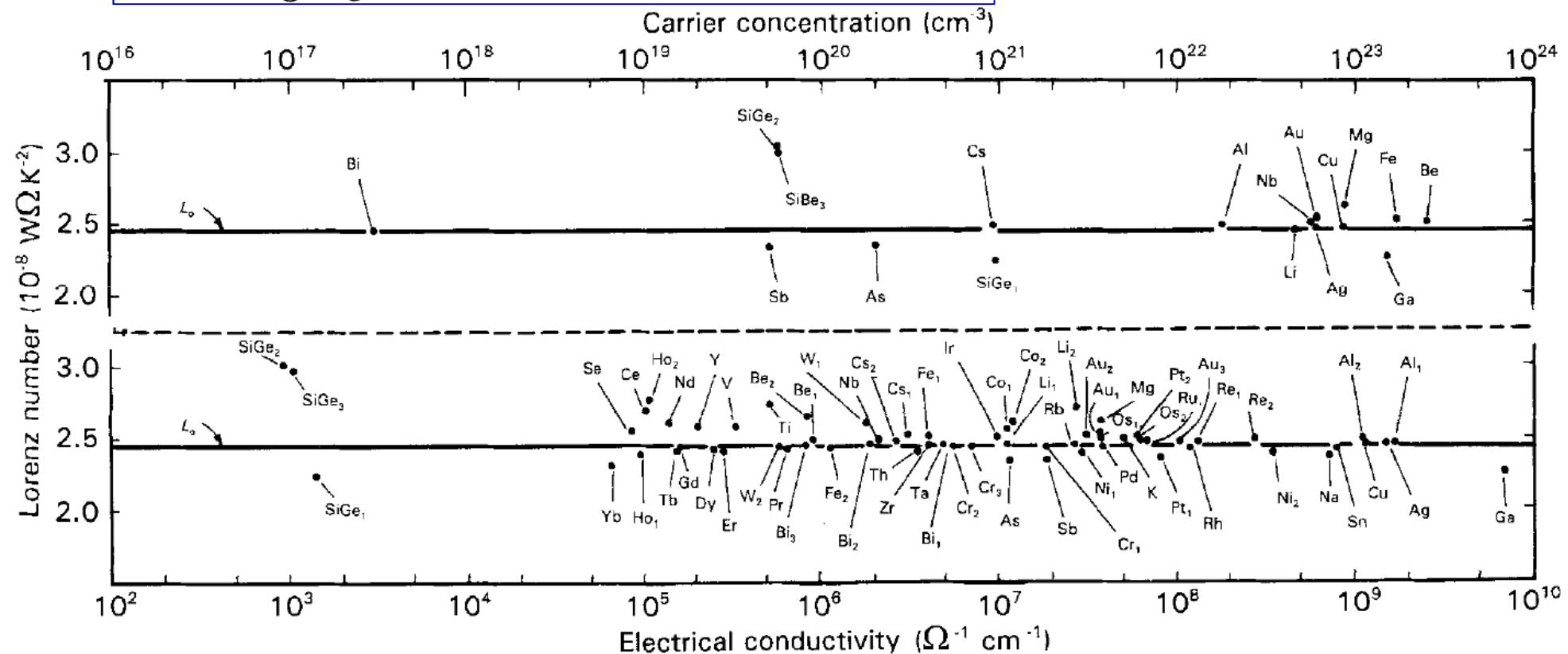
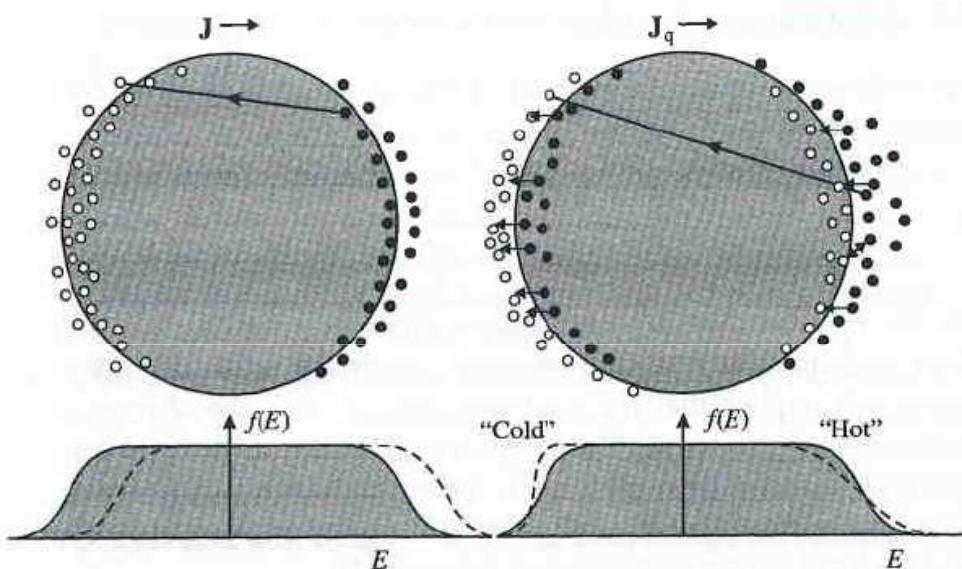


Figure 2 Experimental Lorenz number of elemental metals in the low-temperature residual resistance regime, see Table I. Also shown are our own data points on a doped, degenerate semiconductor (Table III). Data are plotted versus electrical conductivity and also versus carrier concentration, taken from Ashcroft and Mermin [24] except for the semiconductors.

Extraído de: Kumar et al. J. Materials Science **28** 4261 (1993)

# Tempos de relaxação: Regra de Matthiessen.

- Experimento: Lei de Wiedmann-Franz não fornece exatamente  $L_0$  (no. de Lorentz):



$$L = \frac{\kappa}{\sigma T} = L_0 \left( \frac{\tau_\kappa}{\tau_\sigma} \right)$$

$\tau_\kappa$ : tempo característico para randomização da energia térmica do elétron.

$\tau_\sigma$ : tempo característico para randomização da velocidade excedente do elétron.

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

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

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

pois tem origem em processos microscópicos *distintos*.

# Regra de Matthiessen.

- Regra de Matthiesen:  $\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_1} + \frac{1}{\tau_2} + \frac{1}{\tau_3} \dots$
- Assume processos de espalhamento de elétrons independentes entre si:
  - Impurezas (desordem) e centros espalhadores.
  - Fônon (vibrações na rede)
  - Interação elétron-elétron
  - etc.
- Falha quando:
  - $\tau$  depende de  $\mathbf{k}$
  - Os resultado de um processo de espalhamento interfere em outro.

# Semicondutores: elétrons e buracos

- Densidade de elétrons (Sommerfeld).

$$n = \frac{1}{V_r} \int_0^\infty \rho(\varepsilon) f_D(\varepsilon, T, \mu) d\varepsilon$$

- Distribuição de elétrons e buracos.

Elétrons na banda de condução (energias acima de  $\mu$ ):

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

Buracos na banda de valência (energias abaixo de  $\mu$ ):

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

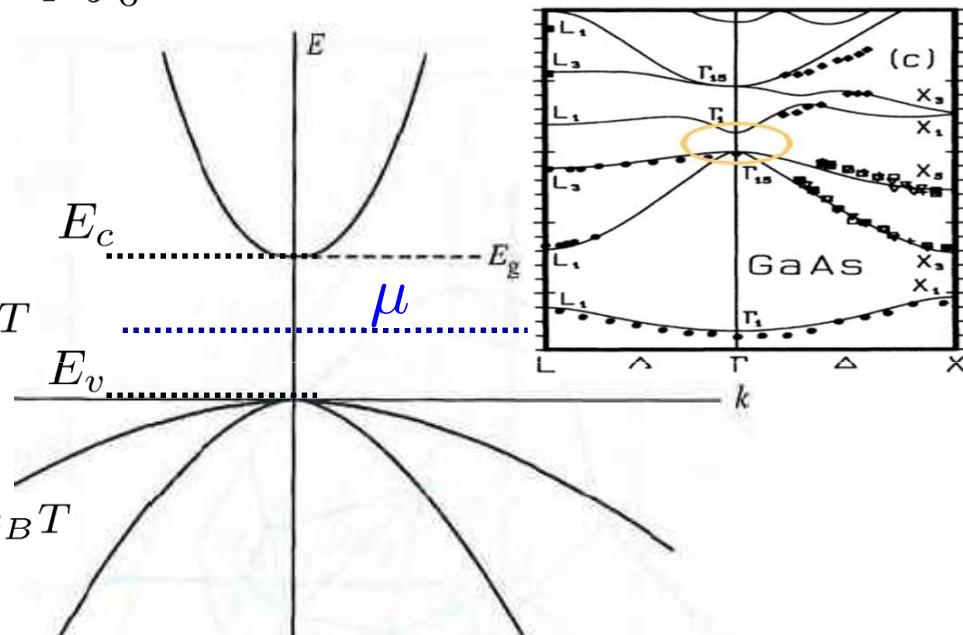
- Densidade de estados de elétrons e buracos

Banda de condução (energias acima de  $E_c$ ):

$$\rho_c(\varepsilon) = V_r C (m_c^*)^{\frac{3}{2}} (\varepsilon - E_c)^{\frac{1}{2}}$$

Banda de valencia (energias abaixo de  $E_v$ ):

$$\rho_v(\varepsilon) = V_r C (m_h^*)^{\frac{3}{2}} (E_v - \varepsilon)^{\frac{1}{2}}$$



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

# Semicondutores: elétrons e buracos

- Densidade de elétrons de condução e valência.

$$n = \frac{1}{V_r} \int_{E_c}^{\infty} \rho_c(\varepsilon) f_D^{(c)}(\varepsilon, T, \mu) d\varepsilon \quad (\varepsilon - \mu \gg k_B T) \Rightarrow n = N_c(T) e^{-\frac{E_c - \mu}{k_B T}}$$

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

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

- “Lei de Ação das Massas”

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

$$E_g = E_c - E_v \quad \text{Gap do semicondutor}$$

$$W = \frac{1}{2\pi^3 \hbar^6} (m_c^* m_h^*)^{\frac{3}{2}} k_B^3$$