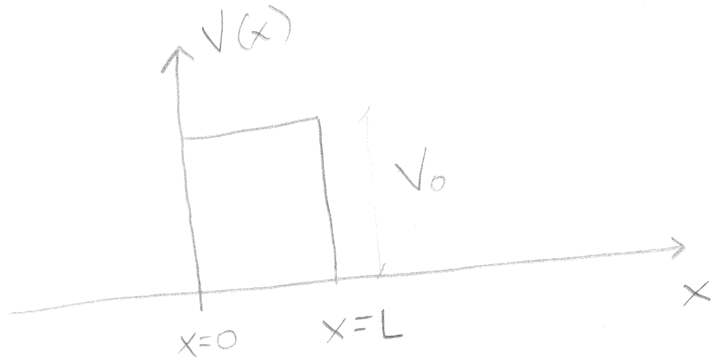
Problema 1

a)

→ Potencial $V(x)$ tipo barrera



→ $V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \text{ (zona I)} \\ V_0 & 0 < x < L \text{ (zona II)} \\ 0 & x > L \text{ (zona III)} \end{cases}$

→ Ecuación de Schroedinger

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V(x)\Psi$$

→ Buscamos soluciones con energía E bien definida

$$\Psi(x,t) = \varphi(x)\, e^{-i\frac{Et}{\hbar}}$$

donde $\varphi(x)$ verifica la ecuación de Sch. indep del tiempo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + V(x)\varphi(x) = E\varphi(x)$$

→ Se desea estudiar el caso en que partículas de energía $E < E_0$ inciden sobre la barrera desde la zona I

→ La sol. de la E-S indep del tiempo en cada zona es:

$$\varphi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} = \varphi_I(x) & \text{I} \\ Ce^{k'x} + De^{-k'x} = \varphi_{II}(x) & \text{II} \\ Fe^{ikx} + Ge^{-ikx} = \varphi_{III}(x) & \text{III} \end{cases} \qquad \underline{\text{Zona}}$$

con: $k = \dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$

$$k' = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

→ El término Ge^{-ikx} corresponde a una onda plana propagándose de der. a izq. en la zona III

Dado que las partículas inciden sobre la barrera en la zona I, este término no tiene sentido físico, por lo tanto

$$\boxed{G = 0}$$

→ Las constantes F, C, D y B se pueden hallar en términos de la amplitud de la onda incidente A aplicando las condiciones de borde.

→ **Condiciones de Borde**

① Continuidad en $x=0$

$$\varphi_{I}(x=0) = \varphi_{II}(x=0)$$

② Continuidad de la derivada en $x=0$

$$\left.\frac{\partial \varphi_{I}}{\partial x}\right|_{x=0} = \left.\frac{\partial \varphi_{II}}{\partial x}\right|_{x=0}$$

③ Continuidad en $x=L$

$$\varphi_{II}(x=L) = \varphi_{III}(x=L)$$

④ Continuidad de la derivada en $x=L$

$$\left.\frac{\partial \varphi_{II}}{\partial x}\right|_{x=L} = \left.\frac{\partial \varphi_{III}}{\partial x}\right|_{x=L}$$

→ En términos de las constantes, las ecuaciones quedan

1. $A + B = C + D$

2. $ik(A - B) = k'(C - D)$

3. $Ce^{k'L} + De^{-k'L} = Fe^{ikL}$

4. $k'(Ce^{k'L} - De^{-k'L}) = ikFe^{ikL}$

b) De las ecuaciones anteriores se obtiene

$$\boxed{F = \frac{4Ae^{ikL}}{4\cosh(k'L) + i\left(\frac{k'}{k} - \frac{k}{k'}\right)\operatorname{senh}(k'L)}}$$

La probabilidad de que los electrones atraviesen la barrera es $T = \frac{|F|^2}{|A|^2}$

$$\Rightarrow \boxed{T = \frac{1}{\cosh^2(k'L) + \frac{1}{16}\frac{V_0-E}{E}\left(1-\frac{E}{V_0-E}\right)^2\operatorname{senh}^2(k'L)}}$$

Problema 2

→ Muestra de Si dopada con impurezas aceptoras en una concentración

$$N_A = 10^{14}\ cm^{-3}$$

→ Para impurezas aceptoras se tiene la relación entre concentraciones de electrones y huecos

$$\boxed{p = n + N_A}$$

→ Además, si se supone $\left\{ \begin{array}{l} E_C - E_F >> kT \\ E_F - E_V >> kT \end{array} \right.$, se tiene la ley de acción de masas

$$np = n_i^2$$

donde n_i es la concentración de portadores del semiconductor intrínseco;

$$n_i = 2\left(\frac{2\pi \left(m_h^* m_e^*\right)^{1/2} kT}{h^2}\right)^{3/2} e^{\frac{-E_G}{2kT}}$$

→ Para el Si a 300K se tiene

$$n_i \simeq 10^{10}\ cm^{-3}$$

$\longrightarrow$ Dado que $n_i << N_A$

de las ecuaciones anteriores se pueden obtener los resultados aproximados

$$p \approx N_A = 10^{14}\ cm^{-3}$$

$$n \approx \frac{n_i^2}{N_A} = 10^{6}\ cm^{-3}$$

b) Si se supone $\begin{cases} E_c - E_F >> kT \\ E_F - E_V >> kT \end{cases}$

se tiene para las concentraciones

$$n = N_c\, e^{-\frac{E_c - E_F}{kT}}$$

$$p = N_V\, e^{-\frac{E_F - E_V}{kT}}$$

siendo $$N_c = 2\left(\frac{m_e^* kT}{2\pi \hbar^2}\right)^{3/2}$$

$$N_V = 2\left(\frac{m_h^* kT}{2\pi \hbar^2}\right)^{3/2}$$

$$\Rightarrow \frac{n}{p} = \frac{N_c}{N_v} e^{-\frac{E_c+E_v-2E_F}{kT}}$$

$$\Rightarrow E_F = \frac{E_c+E_v}{2} + \frac{kT}{2}\ln\left(\frac{n}{p}\right) + \frac{kT}{2}\ln\frac{N_v}{N_c}$$

$$\Rightarrow \boxed{E_F = \frac{E_c+E_v}{2} + \frac{kT}{2}\ln\left(\frac{n}{p}\right) + \frac{3kT}{4}\ln\left(\frac{m_h^*}{m_e^*}\right)} \quad (1)$$

dónde $\frac{E_c+E_v}{2}$ es la energía del medio del Gap.

→ Para el semiconductor intrínseco $n=p$ y la distáncia del nivel de fermi al medio del gap a $T=300K$ es

$$E_F - \frac{E_c+E_v}{2} = \frac{3}{4}kT\ln\left(\frac{m_h^*}{m_e^*}\right) = -13{,}44\,\text{meV}$$

letra $m_h^* = 0{,}49 m_e$

$m_e^* = 0{,}98\, m_e$

c) De la ecuación 1 se tiene, para el semicond dopado

$$E_F - \frac{E_c+E_v}{2} = \frac{3kT}{4}\ln\left(\frac{m_h^*}{m_e^*}\right) + \frac{kT}{2}\ln\left(\frac{n}{p}\right)$$

$\longrightarrow$ De la parte a)

$$n \approx 10^6 \text{ cm}$$

$$p \approx 10^{14}$$

$$\Rightarrow E_F - \frac{E_c+E_v}{2} = -13{,}44\text{meV} - kT\,4\ln(10)$$

$$= -13{,}44\text{meV} - 238\text{meV}$$

$$\approx -251\text{meV}$$

Problema 3

→ La ec. de Schrödinger indep del tiempo
a) del sistema es

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\varphi(\vec{r}) + U(r)\varphi(\vec{r}) = E\varphi(\vec{r})$$

donde $\vec{r}$ es la coord que indica la posición relativa de los átomos

→ Dado que el potencial $U(r)$ sólo depende de la distancia entre los átomos $r = |\vec{r}|$, es conveniente trabajar en coordenadas esféricas

→ El Laplaciano en esféricas es:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2 \operatorname{sen}\theta}\frac{\partial}{\partial \theta}\operatorname{sen}\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{r^2\operatorname{sen}^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$

→ Consideramos soluciones de la E-S con simetría esférica

$$\varphi(\vec{r}) = \frac{f(r)}{r}$$

$$\Longrightarrow \nabla^2 \varphi(\vec{r}) = \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \; r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \frac{f(r)}{r}$$

dado que $\varphi(\vec{r})$ no depende de θ

ni de φ.

$\longrightarrow$ Operando en la expresión anterior se tiene

$$\nabla^2 \varphi(\vec{r}) = \frac{1}{r} \frac{d^2 f(r)}{d r^2}$$

$\longrightarrow$ Sustituyendo esta expresión y la exp. para $\varphi(\vec{r})$ en la ecuación de Sch. indep. del tiempo se tiene

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{d^2 f(r)}{d r^2} + \frac{k}{2}(r - r_e)^2 \frac{1}{r} f(r) - \varepsilon \frac{f(r)}{r} = E \frac{f(r)}{r}$$

$\longrightarrow$ Para $r \neq 0$

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 f}{d r^2} + \frac{k(r - r_e)^2}{2} f - \varepsilon f = E f} \quad \text{Ec } 1$$

Observaciones

* La ecuación para $f(r)$ corresponde a la de un oscilador armónico unidimensional centrado en $r = r_e$ con energía potencial mínima $-\varepsilon$

* Se debe observar sin embargo que la ecuación está definida sólo para $r > 0$

$\Longrightarrow$ Suponemos que r_e es lo suficientemente grande como para que las sols. del oscilador armónico (que decaen exponencialmente lejos de r_e) sean lo suficientemente chicas cerca del origen de manera tal de ser buenas aproximaciones de la sol. de la ec ①.

En esta aproximación, es posible ignorar la condición de borde en el origen.

b) La función de onda del estado de mínima energía corresponde a tomar

$$f(r) = A\, e^{-(r-r_e)^2 b}$$

Tomando el cambio de variable $\tilde{r} = r - r_{eq}$, observando que $\frac{d^2}{d\tilde{r}^2} = \frac{d^2}{dr^2}$, se tiene, al sustituir está expresión de $f(\tilde{r})$ en ①:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[4\tilde{r}^2 b^2 - 2b\right]\cancel{A e^{-\tilde{r}^2 b}} + \left[\frac{k}{2}\tilde{r}^2 - \varepsilon\right]\cancel{A e^{-\tilde{r}^2 b}} = E\,\cancel{A e^{-\tilde{r}^2 b}}$$

→ Para que esta ecuación se cumpla para todo $\tilde{r}$ se debe cumplir

$$* \quad \frac{4\hbar^2 b^2}{\mu} = k$$

$$* \quad E = \frac{b\hbar^2}{\mu} - \varepsilon$$

$$\Longrightarrow \boxed{b = \frac{\sqrt{k\mu}}{2\hbar}} \qquad \boxed{E = \frac{\hbar}{2}\sqrt{\frac{k}{\mu}} - \varepsilon}$$

La energía hallada es la energía del estado de menor E del oscilador menos ε.

→ Para que se pueda formar una molécula debe existir al menos un estado ligado.

Basta con que el estado de mínima energía sea un estado ligado.

Observando la gráfica vemos que los estados ligados son aquellos con energía menor a 0.

$\Rightarrow$ Para que se forme la molécula la energía del estado de menor energía debe ser menor a cero:

$$E = \frac{\hbar}{2}\sqrt{\frac{k}{\mu}} - \varepsilon < 0$$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{\hbar}{2}\sqrt{\frac{k}{\mu}} < \varepsilon}$$

)24