

Práctica 1: Fundamentos de semiconductores

Autor: Diego L. Peña Colaiocco

Fecha: 9 de octubre de 2017

Advertencia: Estas notas no han sido revisadas por ningún tercero por lo que probablemente contienen errores.

Índice

	Página
1.1 Resumen	1-1
1.2 Estructura cristalina de los sólidos	1-1
1.3 Mecánica cuántica	1-6
1.4 Fórmulas útiles	1-15
1.4.1 Estructura cristalina de los sólidos	1-15
1.4.2 Mecánica cuántica	1-16
Referencias	1-17

1.1. Resumen

El objetivo de esta práctica es aclarar conceptos y resolver problemas relacionados con la estructura cristalina de los sólidos y con algunos conceptos básicos de la mecánica cuántica.

1.2. Estructura cristalina de los sólidos

Ejemplo 1.2.1 Demuestre que dos planos paralelos tienen el mismo índice de Miller.

Solución:

Considérense dos planos paralelos que intersecan a los tres ejes coordenados, como se muestra en la figura 1.1a. Considérese ahora la intersección de ambos planos con el plano xy , como se muestra en la figura 1.1b. Como los planos son paralelos, las rectas de la figura 1.1b también lo son. Esto implica que ambas rectas deben tener la misma pendiente. Por lo tanto:

$$-\frac{b}{a} = -\frac{e}{d} \Rightarrow \frac{d}{a} = \frac{e}{b}$$

Otra manera de justificar la ecuación anterior es notando que los dos triángulos rectángulos formados por los ejes x e y y las rectas paralelas son semejantes.

Realizando análisis similares para los planos xz y yz se obtiene que:

$$\frac{f}{c} = \frac{d}{a}$$

$$\frac{e}{b} = \frac{f}{c}$$

Y combinando las tres ecuaciones anteriores resulta:

$$\frac{d}{a} = \frac{e}{b} = \frac{f}{c} = k$$

Se concluye entonces que $d = k \cdot a$, $e = k \cdot b$ y $f = k \cdot c$. Por propiedades del mínimo común múltiplo se sabe que:

$$mcm(d, e, f) = mcm(k \cdot a, k \cdot b, k \cdot c) = k \cdot mcm(a, b, c)$$

Finalmente, el índice de Miller del segundo plano será:

$$\left(\frac{mcm(d, e, f)}{d} \frac{mcm(d, e, f)}{e} \frac{mcm(d, e, f)}{f} \right) = \left(\frac{k \cdot mcm(a, b, c)}{k \cdot a} \frac{k \cdot mcm(a, b, c)}{k \cdot b} \frac{k \cdot mcm(a, b, c)}{k \cdot c} \right)$$

$$= \left(\frac{mcm(a, b, c)}{a} \frac{mcm(a, b, c)}{b} \frac{mcm(a, b, c)}{c} \right)$$

Que como se ve es igual al índice de Miller del primer plano. Los casos en los que los planos paralelos no intersecan a todos los ejes coordenados se resuelven de manera similar y se dejan como ejercicio al lector.

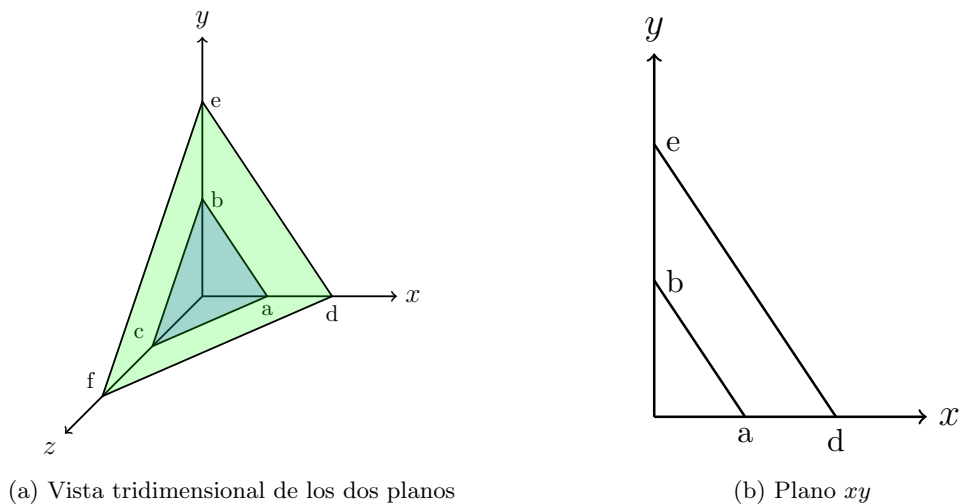


Figura 1.1: Dos planos paralelos que intersecan los tres ejes coordenados.

■

El ejemplo anterior muestra que los índices de Miller no definen a un plano específicamente, sino a una familia de éstos. Es decir, los índices de Miller definen la orientación del plano, pero no su posición absoluta. Otra manera de demostrar el enunciado del ejemplo 1.2.1 es notando que el vector cuyas componentes son el índice de Miller de un plano es perpendicular a dicho plano.

Ejemplo 1.2.2 *Determine la densidad superficial de átomos en los planos (100), (101) y (111) de un cristal de Silicio puro. Determine además la densidad atómica y la densidad del Silicio.*

Solución:

En un cristal de Silicio los átomos se ordenan en un patrón conocido como *diamante* o *zincblende*. En la figura 1.2 se muestra la celda unitaria de este patrón. Como se verá, todas las densidades solicitadas pueden determinarse a partir de ésta celda básica.

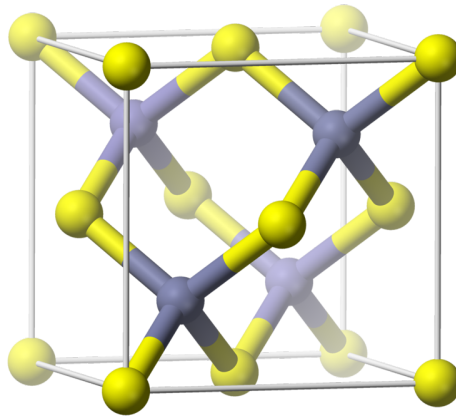


Figura 1.2: Celda unitaria del patrón *zincblende*. Los átomos en amarillo están en contacto con alguna de las caras del cubo, y los átomos en gris no. En el caso del Silicio el lado del cubo es $5,43\text{\AA}$

En la figura 1.3 se muestran los planos correspondientes a los índices de Miller (100), (101) y (111).

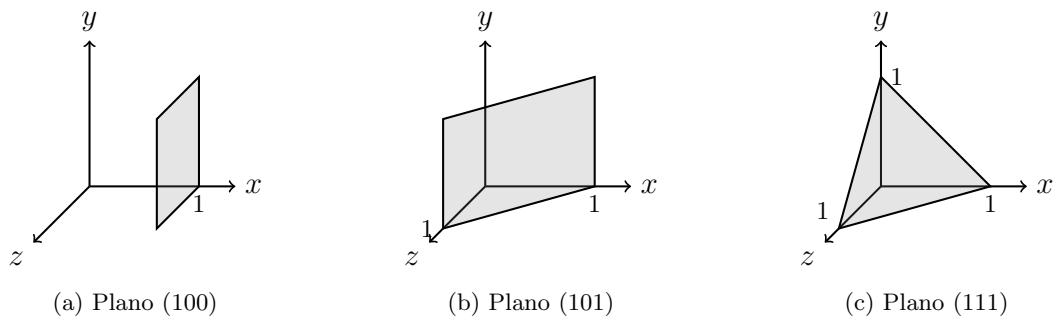
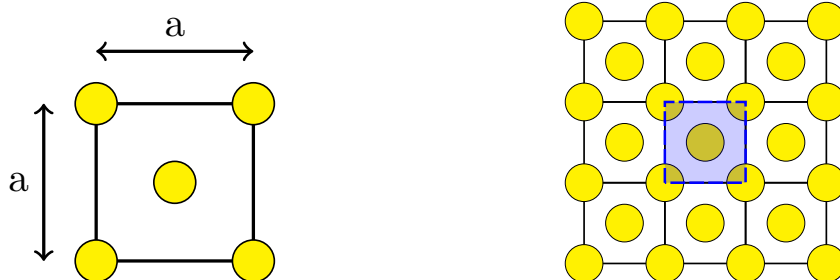


Figura 1.3: Algunos planos con sus respectivos índices de Miller

Para determinar la densidad superficial en el plano (100) se debe primero determinar el patrón que siguen los átomos en ese plano. Con ese fin se determina primero cuáles átomos de la figura 1.2 están en el plano (100) (figura 1.3a). Analizando las figuras mencionadas se

determina que los átomos de la celda unitaria en el plano (100) se distribuyen como se muestra en la figura 1.4a.

De la misma manera en la que la celda unitaria tridimensional de la figura 1.2 se repite en el espacio, la celda obtenida en la figura 1.4a se repetirá indefinidamente en el plano (100), como se muestra en la figura 1.4b. Con esta información ya se puede determinar la densidad superficial de átomos en el plano (100).



(a) Átomos de la celda unitaria del patrón *zincblende* (b) Átomos del patrón *zincblende* en el plano (100) en el plano (100).

Figura 1.4: Distribución de los átomos del patrón *zincblende* en el plano (100).

Para hacer este cálculo se utilizará la regularidad del patrón. En la figura 1.4b se resaltó en azul una celda unitaria como la de la figura 1.4a. Se observa que los átomos de las esquinas son compartidos por cuatro celdas distintas, por lo que podemos considerar que sólo $\frac{1}{4}$ de los mismos están dentro de la celda. De igual manera, el átomo del centro de la celda pertenece exclusivamente a la misma. Esto quiere decir que hay, en promedio

$$4 \cdot \frac{1}{4} + 1 = 2 \frac{\text{átomos}}{\text{celda}}$$

Como se ve en la figura 1.4a, el área de una celda unitaria en el plano (100) es $a \cdot a = a^2 = (5,43\text{Å})^2 = 2,95 \cdot 10^{-15} \text{ cm}^2$. Por ende se puede decir que la superficie tiene $2,95 \cdot 10^{-15} \frac{\text{cm}^2}{\text{celda}}$. Dividiendo ambas cantidades resulta:

$$(\text{Densidad atómica superficial})_{100} = \frac{2 \frac{\text{átomos}}{\text{celda}}}{2,95 \cdot 10^{-15} \frac{\text{cm}^2}{\text{celda}}} = 6,78 \cdot 10^{14} \frac{\text{átomos}}{\text{cm}^2}$$

La determinación de las demás densidades superficiales se hace de manera similar. En la figura 1.5a se ve como se distribuyen los átomos de la celda unitaria en el plano (101), y en la figura 1.5b se muestra como se distribuyen los átomos a través de todo el plano. En cada celda hay 4 átomos compartidos por 4 celdas (en las esquinas), 2 átomos compartidos por 2 celdas (arriba y abajo), y 2 átomos dentro de la celda. Por lo tanto hay, en promedio:

$$4 \cdot \frac{1}{4} + 2 \cdot \frac{1}{2} + 2 = 4 \frac{\text{átomos}}{\text{celda}}$$

La celda unitaria en el plano (101) no es un cuadrado, como se ve en la figura 1.3b. Se ve que la longitud de uno de los lados sigue siendo a . La longitud del otro lado se puede hallar

fácilmente con el teorema de Pitágoras, y se obtiene que es $\sqrt{a^2 + a^2} = \sqrt{2} \cdot a$. Por ende el área de la celda unitaria es $a \cdot \sqrt{2} \cdot a = \sqrt{2} \cdot a^2 = \sqrt{2} \cdot (5,43\text{Å})^2 = 4,17 \cdot 10^{-15} \text{ cm}^2$. Por lo tanto la densidad atómica superficial será:

$$(\text{Densidad atómica superficial})_{101} = \frac{4 \frac{\text{átomos}}{\text{celda}}}{4,17 \cdot 10^{-15} \frac{\text{cm}^2}{\text{celda}}} = 9,59 \cdot 10^{14} \frac{\text{átomos}}{\text{cm}^2}$$

El caso del plano (111) es ligeramente diferente porque como se ve en la figura 1.3c en este caso la celda unitaria en ese plano será un triángulo. Los lados del triángulo se pueden calcular también con el teorema de Pitágoras, y se obtiene que los tres son iguales a $\sqrt{2} \cdot a$, por lo que el triángulo es equilátero. El área del triángulo será entonces $\frac{1}{2} \cdot (\sqrt{2} \cdot a) \cdot (\sqrt{2} \cdot a \cdot \text{sen}(60)) = \frac{\sqrt{3}}{2} \cdot a^2 = \frac{\sqrt{3}}{2} \cdot (5,43\text{Å})^2 = 2,55 \cdot 10^{-15} \text{ cm}^2$.

En la figura 1.6a se muestra la distribución de los átomos de la celda unitaria en el plano (111), y en la figura 1.6b se observa como éstos átomos llenan ese plano. Los átomos en los vértices del triángulo pertenecen a 6 celdas unitarias, y los que están en los lados del triángulo pertenecen a 2 celdas. Por lo tanto hay, en promedio:

$$3 \cdot \frac{1}{6} + 3 \cdot \frac{1}{2} = 2 \frac{\text{átomos}}{\text{celda}}$$

Se tiene que la densidad superficial de átomos será, entonces:

$$(\text{Densidad atómica superficial})_{111} = \frac{2 \frac{\text{átomos}}{\text{celda}}}{2,55 \cdot 10^{-15} \frac{\text{cm}^2}{\text{celda}}} = 7,84 \cdot 10^{14} \frac{\text{átomos}}{\text{cm}^2}$$



(a) Átomos de la celda unitaria del patrón *zincblende* (b) Átomos del patrón *zincblende* en el plano (101). en el plano (101).

Figura 1.5: Distribución de los átomos del patrón *zincblende* en el plano (101).

El cálculo de la densidad atómica del Silicio se realiza prácticamente de igual manera que el de la densidad superficial. En este caso se tiene que el volumen de la celda unitaria es $a^3 = (5,43\text{Å})^3 = 1,60 \cdot 10^{-22} \cdot \text{cm}^3$. Para el número de átomos por celda se tiene en cuenta que los átomos en las esquinas de la celda son compartidos por 8 celdas, los de las caras por 2 celdas, y los del interior de la celda no están compartidos. Por lo tanto hay, en promedio:

$$8 \cdot \frac{1}{8} + 6 \cdot \frac{1}{2} + 4 = 8 \frac{\text{átomos}}{\text{celda}}$$



(a) Átomos de la celda unitaria del patrón *zincblende* (b) Átomos del patrón *zincblende* en el plano (100) en el plano (111).

Figura 1.6: Distribución de los átomos del patrón *zincblende* en el plano (111).

Se tiene entonces que la densidad atómica será:

$$(\text{Densidad atómica})_{111} = \frac{8 \frac{\text{átomos}}{\text{celda}}}{1,60 \cdot 10^{-22} \frac{\text{cm}^3}{\text{celda}}} = 5 \cdot 10^{22} \frac{\text{átomos}}{\text{cm}^3}$$

El peso atómico del Silicio es 28 u, por lo que un mol de Silicio pesa 28 g. Como en un mol hay $6,022 \cdot 10^{23}$ átomos, se tiene que el peso de un átomo de Silicio es $\frac{28}{6,022 \cdot 10^{23}} = 4,65 \cdot 10^{-23}$ g. Finalmente:

$$(\text{Densidad del Silicio}) = 4,65 \cdot 10^{-23} \frac{\text{g}}{\text{átomo}} \cdot 5 \cdot 10^{22} \frac{\text{átomos}}{\text{cm}^3} = 2,32 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3}$$

El valor real de la densidad del Silicio es $2,3290 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3}$. La diferencia entre el valor real y el calculado en este ejercicio es del 0,4 %, error lo suficientemente pequeño como para suponer que se debe a las aproximaciones realizadas. Los valores reales de las densidades atómicas superficiales del Silicio son $6,78 \cdot 10^{22} \frac{\text{átomos}}{\text{cm}^2}$, $9,59 \cdot 10^{22} \frac{\text{átomos}}{\text{cm}^2}$ y $7,83 \cdot 10^{22} \frac{\text{átomos}}{\text{cm}^2}$ para los planos (100), (101) y (110), respectivamente. Estos valores coinciden con los determinados en este ejemplo. ■

1.3. Mecánica cuántica

Ejemplo 1.3.1 Un electrón se describe mediante una onda plana que viene dada por $A \cdot e^{j(kx - \omega t)}$, donde $k = 1,5 \cdot 10^9 \text{ m}^{-1}$ y $\omega = 1,5 \cdot 10^{13} \frac{\text{rad}}{\text{s}}$.

- Determine la velocidad de fase de la onda plana.
- Calcule la longitud de onda, el momentum y la energía cinética (en eV) del electrón.

Solución:

- La velocidad de fase de la onda será:

$$v_{\text{fase}} = \frac{\omega}{k} = \frac{1,5 \cdot 10^{13} \frac{\text{rad}}{\text{s}}}{1,5 \cdot 10^9 \text{ m}^{-1}} = 1 \cdot 10^4 \frac{\text{m}}{\text{s}}$$

(b) De la longitud de onda de De Broglie se tiene que:

$$\begin{aligned} p &= \frac{h}{\lambda} = \frac{\frac{h}{2\pi}}{\frac{\lambda}{2\pi}} = \hbar \cdot k = 6,582 \cdot 10^{-16} \text{eV} \cdot \text{s} \cdot 1,5 \cdot 10^9 \text{m}^{-1} = 9,873 \cdot 10^{-7} \frac{\text{eV} \cdot \text{s}}{\text{m}} \\ &= 9,873 \cdot 10^{-7} \cdot 1,602 \cdot 10^{-19} \text{J} \cdot \frac{\text{s}}{\text{m}} = 1,582 \cdot 10^{-25} \frac{\text{Kg} \cdot \text{m}}{\text{s}} \end{aligned}$$

La longitud de onda del electrón es:

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{2\pi}{1,5 \cdot 10^9 \text{m}^{-1}} = 4,189 \cdot 10^{-9} \text{m} = 41,89 \text{\AA}$$

Como la energía cinética es $T = \frac{1}{2}mv^2$ y $p = mv$ se concluye que:

$$T = \frac{p^2}{2 \cdot m} = \frac{(9,873 \cdot 10^{-7} \frac{\text{eV} \cdot \text{s}}{\text{m}})^2}{2 \cdot 0,511 \cdot 10^6 \frac{\text{eV}}{c^2}} = 9,536 \cdot 10^{-19} \cdot \text{eV} \cdot \frac{\text{s}^2}{\text{m}^2} \cdot \left(3 \cdot 10^8 \cdot \frac{\text{m}}{\text{s}}\right)^2 = 85,84 \text{meV}$$

Comentario:

Un lector desprevenido podría pensar que la energía cinética del electrón es:

$$E = h \cdot \nu = \frac{h}{2\pi} \cdot (2\pi \cdot \nu) = \hbar \omega = 6,582 \cdot 10^{-16} \text{eV} \cdot \text{s} \cdot 1,5 \cdot 10^{13} \frac{\text{rad}}{\text{s}} = 9,873 \text{meV}$$

Sin embargo, este resultado no se corresponde con el determinado en la solución del problema. El error en este razonamiento está en que, en la fórmula $E = h \cdot \nu$, el valor de E corresponde a la energía *total* del electrón, y no a su energía cinética. Es decir, $E = T + V$, donde T es la energía cinética del electrón y V es su energía potencial.

Una conclusión interesante del análisis anterior es que el electrón del problema **no** es un electrón libre. De acuerdo a éste análisis se tiene que:

$$V = E - T = 9,873 \text{meV} - 85,84 \text{meV} = -75,967 \text{meV}$$

Otra manera de comprobar esto es reemplazando $\Psi(x, t) = A \cdot e^{j(kx - \omega t)}$ en la ecuación de Schrödinger, como se muestra a continuación:

$$\begin{aligned} &\frac{-\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x) \cdot \Psi(x, t) = j\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} \\ \Rightarrow &\frac{-\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2 (A \cdot e^{j(kx - \omega t)})}{\partial x^2} + V(x) \cdot A \cdot e^{j(kx - \omega t)} = j\hbar \frac{\partial (A \cdot e^{j(kx - \omega t)})}{\partial t} \\ \Rightarrow &\frac{-\hbar^2}{2m} \cdot (jk)^2 \cdot A \cdot e^{j(kx - \omega t)} + V(x) \cdot A \cdot e^{j(kx - \omega t)} = j\hbar \cdot (-j\omega) \cdot A \cdot e^{j(kx - \omega t)} \\ &\Rightarrow \frac{\hbar^2 \cdot k^2}{2m} + V(x) = \hbar \omega \\ &\Rightarrow V(x) = \hbar \omega - \frac{\hbar^2 \cdot k^2}{2m} \end{aligned}$$

Utilizando los datos del problema se deduce que:

$$\begin{aligned} V(x) &= 6,582 \cdot 10^{-16} \text{eV} \cdot \text{s} \cdot 1,5 \cdot 10^{13} \frac{\text{rad}}{\text{s}} - \frac{(6,582 \cdot 10^{-16} \text{eV} \cdot \text{s} \cdot 1,5 \cdot 10^9 \text{m}^{-1})^2}{2 \cdot 0,511 \cdot 10^6 \frac{\text{eV}}{c^2}} \\ &= 9,873 \text{meV} - 9,538 \cdot 10^{-19} \text{eV} \cdot \frac{\text{s}^2}{\text{m}^2} \cdot (3 \cdot 10^8 \frac{\text{m}}{\text{s}})^2 \\ &= -75,969 \text{meV} \end{aligned}$$

Valor que coincide con el calculado anteriormente. ■

Ejemplo 1.3.2 Calcule los niveles de energía permitidos para un electrón en un pozo de potencial infinito.

Solución:

En la figura 1.7 se muestra un pozo de potencial infinito.

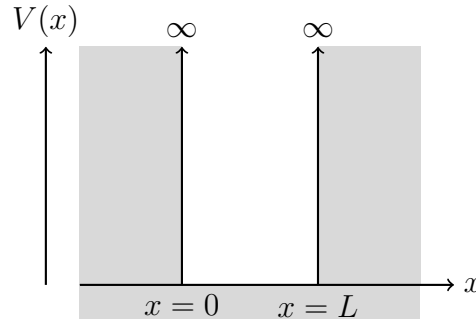


Figura 1.7: Pozo de potencial infinito.

Dado que el potencial es infinito fuera del pozo, se tendrá que el electrón no podrá estar fuera del mismo. Por lo tanto, $\psi(x) = 0$ si $x < 0$ o $x > L$. Como ψ debe ser continua, esto implica que $\psi(0) = \psi(L) = 0$.

Dentro del pozo de potencial se tiene que $V(x) = 0$, por lo que, de acuerdo a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo:

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \cdot E \cdot \psi(x) = 0$$

Esta es una ecuación diferencial lineal homogénea de segundo orden. Como su polinomio característico es:

$$\lambda^2 + \frac{2m}{\hbar^2} \cdot E = \left(\lambda - j \cdot \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \right) \cdot \left(\lambda + j \cdot \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \right)$$

Se deduce que $\psi(x)$ debe ser de la forma:

$$\psi(x) = A \cdot \text{sen} \left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \cdot x \right) + B \cdot \text{cos} \left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \cdot x \right)$$

Utilizando las condiciones de frontera se obtiene que:

$$\psi(0) = A \cdot \operatorname{sen} \left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \cdot 0 \right) + B \cdot \cos \left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \cdot 0 \right) = B = 0 \Rightarrow \psi(x) = A \cdot \operatorname{sen} \left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \cdot x \right)$$

$$\psi(L) = A \cdot \operatorname{sen} \left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \cdot L \right) = 0$$

La última ecuación implica que $\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \cdot L = n\pi$ para algún entero n , de donde se deduce que los niveles de energía permitidos son:

$$E_n = \frac{\hbar^2 \cdot n^2 \cdot \pi^2}{2m \cdot L^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Comentario:

La derivada *por la derecha* de $\psi(x)$ en 0 es

$$\left. \frac{d \left(A \cdot \operatorname{sen} \left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \cdot x \right) \right)}{dt} \right|_{x=0} = A \cdot \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

La derivada *por la izquierda* de $\psi(x)$ en 0 es, en cambio:

$$\left. \frac{d(0)}{dt} \right|_{x=0} = 0$$

Como ambas derivadas son distintas, concluimos que $\psi'(x)$ **no** es continua en $x = 0$. Un análisis similar muestra que $\psi'(x)$ tampoco es continua en $x = L$.

Sin entrar en los detalles matemáticos, la razón de que en este caso $\psi'(x)$ no sea continua en $x = 0$ y $x = L$ es que en esos puntos el potencial $V(x)$ pasa de ser finito a ser infinito. Una explicación (un poco) más rigurosa de este fenómeno se encuentra en la sección 3.2 de Schwabl (2007). ■

Ejemplo 1.3.3 *Determine si los niveles de energía permitidos para un electrón con $E < V_0$ son discretos o continuos, si el potencial $V(x)$ es el mostrado en la figura 1.8.*

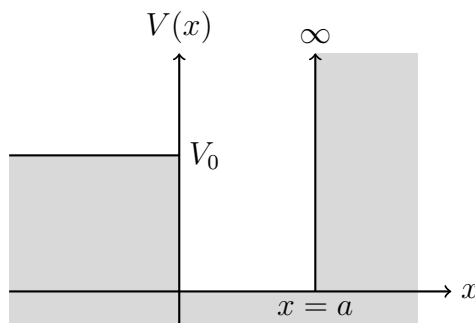


Figura 1.8: Potencial para el ejemplo 1.3.3.

Solución:

Para resolver este tipo de problemas es necesario encontrar una ecuación que deba ser satisfecha por la energía E y que no involucre más incógnitas del problema. Para determinar esta ecuación es necesario analizar las diferentes regiones del problema de acuerdo a la ecuación de Schrödinger, y utilizar las condiciones de continuidad de la función de onda. Usualmente al terminar este análisis se tendrá un sistema de ecuaciones, a partir del cuál se obtendrá la ecuación buscada.

Una vez obtenida esa ecuación es necesario analizarla para determinar si ella implica que E es discreta o continua. En algunos casos, como en el problema del pozo de potencial infinito (en el cual $\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \cdot L = n\pi$), la ecuación es sencilla y puede ser resuelta. En otros casos, como en este problema, la ecuación resultante es más complicada.

Como para $x \geq a$ se tiene que $V(x) = \infty$, resulta que $\psi(x) = 0$ para $x \geq a$.

En la región definida por $0 \leq x \leq a$ se tendrá que:

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \cdot E \cdot \psi(x) = 0$$

La solución general para esta ecuación viene dada por:

$$\psi(x) = A \cdot e^{(j\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \cdot x)} + B \cdot e^{(-j\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \cdot x)}$$

Finalmente, en la región definida por $x \leq 0$ se tendrá, en cambio, que:

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} - \frac{2m}{\hbar^2} \cdot (V_0 - E) \cdot \psi(x) = 0$$

La solución general de esta ecuación es:

$$\psi(x) = C \cdot e^{(\frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar} \cdot x)} + D \cdot e^{(-\frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar} \cdot x)}$$

Como $\psi(x)$ no puede crecer indefinidamente, se debe tener que $D = 0$ (recuerde que en esta región $x < 0$).

En resumen:

$$\begin{aligned}\psi(x) &= 0 & 0 \leq x \leq a \\ \psi(x) &= A \cdot e^{\left(j \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \cdot x\right)} + B \cdot e^{\left(-j \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \cdot x\right)} & a \leq x \\ \psi(x) &= C \cdot e^{\left(\frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar} \cdot x\right)} & 0 \leq x \leq a\end{aligned}$$

Como $\psi(x)$ debe ser continua en $x = 0$ y $x = a$ se tiene que:

$$C = A + B$$

$$A \cdot e^{\left(j \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \cdot a\right)} + B \cdot e^{\left(-j \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \cdot a\right)} = 0$$

Como $\psi'(x)$ debe ser continua en $x = 0$ se tiene que:

$$\begin{aligned}\frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar} \cdot C \cdot e^{\left(\frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar} \cdot x\right)} \Big|_{x=0} &= j \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \cdot A \cdot e^{\left(j \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \cdot x\right)} - j \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \cdot B \cdot e^{\left(-j \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \cdot x\right)} \Big|_{x=0} \\ \Rightarrow \frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar} \cdot C &= j \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \cdot A - j \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \cdot B\end{aligned}$$

note que, como se explicó en el comentario del ejemplo 1.7, $\psi'(x)$ no está obligada a ser continua en $x = a$. Finalmente, tenemos el siguiente sistemas de ecuaciones:

$$\begin{aligned}A + B - C &= 0 \\ j \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \cdot A - j \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \cdot B - \frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar} \cdot C &= 0 \\ A \cdot e^{\left(j \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \cdot a\right)} + B \cdot e^{\left(-j \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \cdot a\right)} &= 0\end{aligned}$$

Para simplificar las ecuaciones, se definen $k_1 = \frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}$ y $k_2 = \frac{\sqrt{2m(E)}}{\hbar}$. Las ecuaciones quedan entonces como:

$$\begin{aligned}A + B - C &= 0 \\ jk_2 \cdot A - jk_2 \cdot B - k_1 \cdot C &= 0 \\ A \cdot e^{jk_2 \cdot a} + B \cdot e^{-jk_2 \cdot a} &= 0\end{aligned}$$

De la tercera ecuación se puede despejar que:

$$B = -\frac{A \cdot e^{jk_2 \cdot a}}{e^{-jk_2 \cdot a}} = -A \cdot e^{2jk_2 \cdot a}$$

Reemplazando este resultado en la primera ecuación se obtiene:

$$C = A + B = A \cdot (1 - e^{2jk_2 \cdot a})$$

Finalmente, reemplazando los valores obtenidos de B y C en la segunda ecuación se obtiene que:

$$jk_2 \cdot A \cdot (1 + e^{2jk_2 \cdot a}) - k_1 \cdot A \cdot (1 - e^{2jk_2 \cdot a}) = 0$$

Dividiendo entre $A \cdot k_1$ y reordenando:

$$\begin{aligned} \frac{jk_2}{k_1} \cdot (1 + e^{2jk_2 \cdot a}) &= (1 - e^{2jk_2 \cdot a}) \\ \Rightarrow 1 - \frac{jk_2}{k_1} &= \frac{jk_2}{k_1} \cdot e^{2jk_2 \cdot a} + e^{2jk_2 \cdot a} \\ \Rightarrow 1 - \frac{jk_2}{k_1} &= e^{2jk_2 \cdot a} \cdot \left(1 + \frac{jk_2}{k_1}\right) \end{aligned} \quad (1.3.1)$$

En la ecuación 1.3.1 las únicas incógnitas que aparecen son k_1 y k_2 . Sin embargo, como $k_1 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$ y $k_2 = \frac{\sqrt{2m(E)}}{\hbar}$ se observa que la única incógnita que aparece realmente en la ecuación 1.3.1 es E . Por lo tanto esta es la ecuación que nos permitirá determinar si E es continua o discreta.

Notando que

$$\|e^{2jk_2 \cdot a}\| = 1$$

Y que

$$\left\|1 - \frac{jk_2}{k_1}\right\| = \sqrt{1 + \left(\frac{k_2}{k_1}\right)^2} = \left\|1 + \frac{jk_2}{k_1}\right\|$$

Resulta que:

$$\left\|1 - \frac{jk_2}{k_1}\right\| = \|e^{2jk_2 \cdot a}\| \cdot \left\|1 + \frac{jk_2}{k_1}\right\|$$

Para que dos números complejos sean iguales sus módulos deben ser iguales y sus argumentos deben diferir en un múltiplo entero de 2π . Se acaba de demostrar que los módulos de los números complejos en la ecuación 1.3.1 son iguales. Por lo tanto, la mencionada ecuación es equivalente a:

$$\begin{aligned}
\angle\left(1 - \frac{jk_2}{k_1}\right) &= \angle\left(e^{2jk_2 \cdot a} \cdot \left(1 + \frac{jk_2}{k_1}\right)\right) \\
\Rightarrow -\arctan\left(\frac{k_2}{k_1}\right) + 2\pi \cdot n &= 2 \cdot k_2 \cdot a + \arctan\left(\frac{k_2}{k_1}\right) \\
\Rightarrow 2\pi \cdot n &= 2 \cdot k_2 \cdot a + 2 \cdot \arctan\left(\frac{k_2}{k_1}\right) \\
\Rightarrow \pi \cdot n &= k_2 \cdot a + \arctan\left(\frac{k_2}{k_1}\right)
\end{aligned}$$

Finalmente, cambiando k_1 y k_2 por sus valores en función de E y V_0 ($k_1 = \frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}$ y $k_2 = \frac{\sqrt{2m(E)}}{\hbar}$) se concluye que:

$$\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \cdot a + \arctan\left(\sqrt{\frac{E}{V_0-E}}\right) = \pi \cdot n \quad (1.3.2)$$

La ecuación 1.3.2 es trascendente, por lo que no se puede despejar el valor de E . Sin embargo, si es posible concluir que E es discreta pues, como $0 \leq E \leq V_0$, se tiene que las funciones $\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \cdot a$ y $\arctan\left(\sqrt{\frac{E}{V_0-E}}\right)$ son crecientes, y por lo tanto su suma también lo es.

Una manera de entender mejor la ecuación anterior es analizar que pasaría en un caso límite. Por ejemplo, si $V_0 \rightarrow \infty$ se tendría nuevamente un pozo de potencial infinito. Luego, incluyendo la condición $V_0 \rightarrow \infty$ en la ecuación 1.3.2 se debería obtener la ecuación de la energía en un pozo de potencial infinito.

En efecto, si $V_0 \rightarrow \infty$ se tiene que $\sqrt{\frac{E}{V_0-E}} \rightarrow 0$, por lo que $\arctan\left(\sqrt{\frac{E}{V_0-E}}\right) \rightarrow \arctan(0) = 0$. La ecuación 1.3.2 se reduce entonces a:

$$\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \cdot a = \pi \cdot n \Rightarrow E = \frac{\hbar^2 \cdot n^2 \cdot \pi^2}{2m \cdot a^2}$$

Que es la energía de un pozo de potencial infinito de ancho a .

Comentario:

Para llegar a la ecuación 1.3.1 se partió del siguiente sistema de ecuaciones:

$$\begin{aligned}
A + B - C &= 0 \\
jk_2 \cdot A - jk_2 \cdot B - k_1 \cdot C &= 0 \\
A \cdot e^{jk_2 \cdot a} + B \cdot e^{-jk_2 \cdot a} &= 0
\end{aligned}$$

Este sistema de ecuaciones lineales anterior tiene 3 incógnitas y 3 ecuaciones. Nótese que $A = B = C = 0$ es una solución del mismo. Sin embargo, esta solución implica que $\psi(x) = 0 \forall x$,

lo que implicaría que no hay ningún electrón. Esto implica que se necesita que el sistema de ecuaciones tenga más de una solución. Y como se estudia en cursos de álgebra lineal, esto es equivalente a querer que el determinante del sistema sea nulo:

$$\det \begin{vmatrix} 1 & 1 & -1 \\ jk_2 & -jk_2 & -k_1 \\ e^{jk_2 \cdot a} & e^{-jk_2 \cdot a} & 0 \end{vmatrix} = 0$$

$$\Rightarrow -(-k_1) \cdot e^{-jk_2 \cdot a} + (-k_1) \cdot e^{jk_2 \cdot a} + (-1) \cdot (jk_2 \cdot e^{-jk_2 \cdot a} + jk_2 \cdot e^{jk_2 \cdot a})$$

$$\Rightarrow k_1 \cdot (e^{-jk_2 \cdot a} - e^{jk_2 \cdot a}) = jk_2 \cdot (e^{-jk_2 \cdot a} + e^{jk_2 \cdot a})$$

Y dividiendo por $k_1 \cdot e^{-jk_2 \cdot a}$ resulta:

$$(1 - e^{2jk_2 \cdot a}) = \frac{jk_2}{k_1} \cdot (1 + e^{2jk_2 \cdot a})$$

$$\Rightarrow 1 - \frac{jk_2}{k_1} = e^{2jk_2 \cdot a} \cdot \left(1 + \frac{jk_2}{k_1}\right)$$

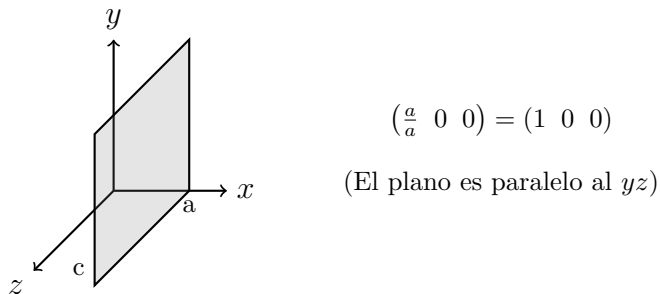
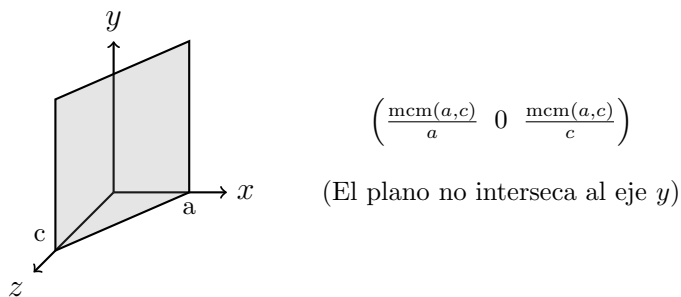
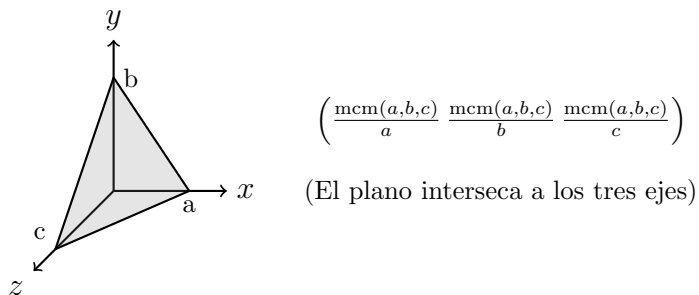
Que es exactamente la ecuación 1.3.1. Se ve, por lo tanto, que otra manera de llegar a la ecuación buscada de la energía es tomando el determinante del sistema de ecuaciones resultante.

■

1.4. Fórmulas útiles

1.4.1. Estructura cristalina de los sólidos

Índices de Miller:



Distancia entre dos planos consecutivos con el mismo índice de Miller:

$$d = \frac{a}{\sqrt{n^2 + h^2 + k^2}} \qquad (nhk) = \text{Índice de Miller del plano.}$$

$a = \text{Constante de la retícula.}$

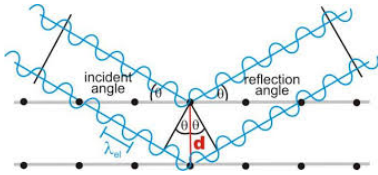
Densidad atómica volumétrica[superficial]:

$$\frac{\text{Número de átomos en una celda unitaria}}{\text{Volumen[Área] de una celda unitaria}}$$

Densidad:

$$\text{Densidad atómica volumétrica} \cdot \frac{\text{Peso atómico}}{\text{Número de Avogadro}}$$

Ley de Bragg:



Ocurre interferencia constructiva cuando, para algún entero n:

$$2 \cdot d \cdot \text{sen}(\theta) = n \cdot \lambda$$

1.4.2. Mecánica cuántica

Energía de un fotón:

$$E = h\nu \quad \nu = \text{Frecuencia del fotón, o de la radiación electromagnética.}$$

Energía de un fotoelectrón:

$$E = h\nu - \phi \quad \phi = \text{Función de trabajo del metal.}$$

Modelo del átomo de Bohr:

$$r = \frac{n^2 \cdot \hbar^2}{Q \cdot e^2 \cdot m_e} \quad K = \text{Constante de Coulomb.}$$

$$v = \frac{n \cdot \hbar}{m_e \cdot r} \quad Z = \text{Número atómico.}$$

$$E = T + U = \frac{Q \cdot e^2}{2r} - \frac{Q \cdot e^2}{r} = -\frac{Q \cdot e^2}{2r} = -\frac{Q^2 \cdot e^4}{2 \cdot \hbar^2 \cdot n^2} \quad Q = K \cdot Z$$

$$r_{\text{Bohr}} = 0,529 \text{ \AA} \quad E_{\text{Rydberg}} = -13,6 \text{ eV}$$

Número de onda:

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

Longitud de onda de De Broglie:

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad p = \text{Momento de la partícula.}$$

Velocidad de grupo:

$$v_{\text{grupo}} = \frac{dw}{dk}$$

Velocidad de fase:

$$v_{\text{fase}} = \lambda \cdot \nu = \frac{\omega}{k}$$

Principio de incertidumbre de Heisenberg:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\Delta t \cdot \Delta E \geq \frac{\hbar}{2}$$

La ecuación de Schrödinger:

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

Si $\Psi(x, t) = \psi(x) \cdot \phi(t)$:

$$\phi(t) = e^{-j\frac{E}{\hbar} \cdot t} = e^{-j\omega t}$$

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \cdot (E - V(x)) \cdot \psi(x) = 0$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\phi(x)|^2 dx = 1$$

Referencias

Neamen, Donald A. (2012). *Semiconductor Physics and Devices, Basic Principles*. McGraw-Hill, 4^a edición.

Schwabl, Franz (2007). *Quantum Mechanics*. Springer, 4^a edición.

Streetman, Ben G. y Kumar Banerjee, Sanjay (2006). *Solid State Electronics Devices*. Pearson, 6^a edición.