

3ª LISTA DE EXERCÍCIOS

**Disciplina:** TE069 - Física de Semicondutores

**Professor:** César Augusto Dartora<sup>1</sup>

---

- 1 A energia de Zeeman associada ao spin, que corresponde ao termo de dipolo magnético para uma partícula com spin  $\mathbf{S}$  em presença de um campo magnético é dada por:

$$H_Z = \pm g \frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{S} \cdot \mathbf{B}$$

sendo  $g$  a constante giromagnética da partícula e  $\mu_B = e\hbar/(2m)$  o magneton de Bohr, o sinal + vale para partículas de carga negativa e - se a carga da partícula for positiva. Para um elétron  $g = 2$  e na presença de um campo magnético ao longo do eixo  $z$  podemos escrever:

$$H_Z = \mu_B \vec{\sigma} \cdot \mathbf{B} = \mu_B \sigma_z B_0 ,$$

onde os valores assumidos por  $\sigma_z$  são  $\sigma = +1$  ou  $\sigma = -1$ .

a) Para um campo magnético  $B_0 = 1T$  determine a separação dos níveis de energia correspondentes ao spin para cima  $\sigma = +1$  (alinhado ao campo) e spin para baixo  $\sigma = -1$  (anti-alinhado ao campo). Qual é a frequência do fóton necessário para produzir uma transição entre esses dois níveis? Obs.: o spin do elétron tende a se anti-alinhar ao campo aplicado pois sua carga é negativa.

b) Determine a susceptibilidade magnética de um gás de elétrons em regime de altas temperaturas, que pode ser calculada através da expressão

$$\chi_m = -\frac{n\mu_B \langle \sigma_z \rangle}{B}$$

assumindo que a probabilidade de um estado de energia com spin  $\sigma$  seja dado por:

$$\rho(\sigma) = \frac{e^{-\beta\mu_B\sigma B}}{Z} ,$$

onde  $Z = e^{-\beta\mu_B B} + e^{\beta\mu_B B}$  é denominada função de partição e  $\beta = 1/(k_B T)$ .

- 2 O elétron tem spin  $S = 1/2$ , o que significa que admite as projeções  $+1/2$  e  $-1/2$  para o seu momento angular intrínseco, normalizado pela constante  $\hbar$ . Isso faz com que a camada  $s$  somente admita dois elétrons,  $p$  pode ter 6 elétrons e assim sucessivamente. Se o elétron fosse uma partícula de spin  $3/2$  quais seriam as regras de preenchimento das camadas eletrônicas  $s, p, d, f$ ? O que aconteceria com a tabela periódica? E o que ocorreria com as propriedades dos materiais se o elétron fosse um bóson e tivesse spin 0?

---

<sup>1</sup>cadartora@eletrica.ufpr.br

- 3 O átomo de Hidrogênio constituído de um próton e um elétron, o mais abundante dos elementos do universo, tem energia do estado fundamental dada por:

$$E_1 = -13.6\text{eV}.$$

A distância média do elétron em relação ao próton é dada pelo raio atômico de Bohr,  $a_0 = 0.589\text{angstrom}$ .

Ao formar uma molécula de  $H_2$ , a configuração ligante deve ter energia total menor do que  $2E_1 = -27.6\text{eV}$ , correspondendo à energia dos dois elétrons em seus respectivos núcleos. Um modelo eletrostático simples para a molécula  $H_2$  é mostrado na Figura 1, onde cada átomo contribui com um elétron em um orbital  $1s$ .

a) Se os elétrons compartilham o mesmo orbital molecular, cuja parte espacial é dada por  $\phi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_{1s}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) + \phi_{1s}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_2)]$ , sendo  $\mathbf{r}_1$  e  $\mathbf{r}_2$  a posição dos prótons (núcleos) qual a configuração dos spins?

b) Considerando-se o modelo eletrostático, a energia potencial entre duas cargas  $Q_i$  e  $Q_j$  é dada por

$$U_{ij} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Q_i Q_j}{R_{ij}}$$

sendo  $R_{ij}$  a distância entre as cargas, determine a energia potencial resultante da configuração das 4 cargas mostradas na figura, dois elétrons e dois prótons, assumindo-se que a distância entre os elétrons e o núcleo seja  $a_0$ . Veja que o resultado é função do ângulo  $\theta$ .

c) Minimize a energia potencial, com relação ao ângulo  $\theta$  e determine a distância interatômica no estado ligante, ou seja, determine a distância entre os dois prótons, em função de  $a_0$ .

d) Sabe-se que a energia do estado fundamental deve valer metade da energia potencial, pois a energia cinética dos elétrons é positiva e tem valor igual a metade do valor da energia potencial em módulo. Uma vez que a energia mínima do sistema foi determinada e sabendo-se que a energia dos dois átomos separados é  $-27.2\text{eV}$  ( $-13.6\text{eV}$  para cada um) determine a energia de ligação e a frequência do fóton mínimo necessário para quebrar uma molécula de  $H_2$ .

- 4 Sabendo-se que o silício e o germânio formam sólidos cristalinos com a estrutura diamante, cada átomo de Si ou Ge no sólido tem 4 primeiros vizinhos formando uma estrutura tetraédrica (pirâmide equilátera com face do tipo triângulo equilátero), onde há um átomo em cada vértice do tetraedro e um átomo centralizado no interior do mesmo. Determine o ângulo formado entre duas ligações de um átomo aos primeiros vizinhos. Veja Figura 2.

- 5 Considere um sistema de três átomos idênticos, cada um contribuindo com um orbital,  $|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle$ , cujo Hamiltoniano possa ser escrito como

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \epsilon & -\Delta & 0 \\ -\Delta & \epsilon & -\Delta \\ 0 & -\Delta & \epsilon \end{pmatrix} \quad (1)$$

Podemos escrever funções de onda gerais na forma

$$|\psi\rangle = a|1\rangle + b|2\rangle + c|3\rangle, \quad (2)$$

tais que

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} \epsilon & -\Delta & 0 \\ -\Delta & \epsilon & -\Delta \\ 0 & -\Delta & \epsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}, \quad (3)$$

- a) Determine as autoenergias e autofunções correspondentes. Explique o que ocorre nesse sistema.
- b) Se cada átomo contribui com um elétron e os orbitais são do tipo  $s$ , qual é a configuração de mais baixa energia?
- 6 O que são fônons? O que são os ramos acústico e óptico? Qual é a relação entre energia e momento para fônons de longo comprimento de onda?
- 7 Para o gás de elétrons livres, cuja relação energia-momento pode ser escrita como

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

determine a densidade de estados nos casos de uma, duas e três dimensões espaciais.

- 8 Determine a relação entre o nível de Fermi e a densidade eletrônica nos metais, considerando-se o modelo gás de elétrons livres. Faça uma lista da densidade eletrônica de alguns metais como sódio, alumínio, cobre, ouro e ferro e então encontre a energia de Fermi correspondente. Há discrepâncias entre os valores obtidos para o nível de Fermi e os valores verdadeiros? Se sim, tente justificar. Consulte uma tabela de valores.

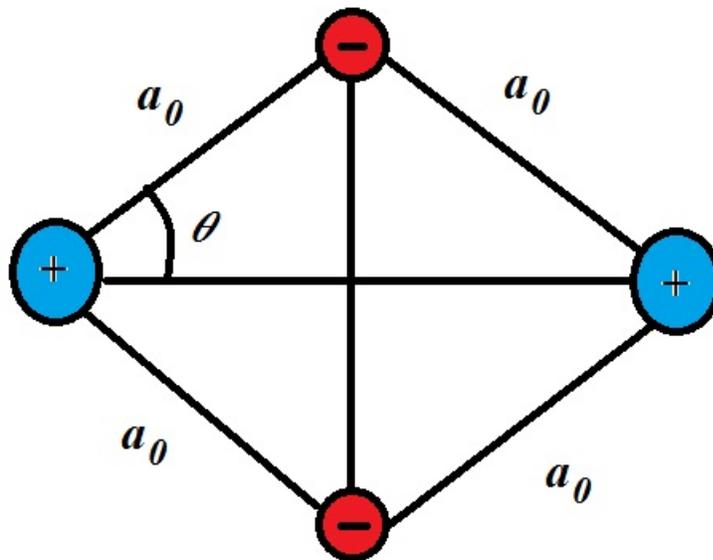


Figura 1

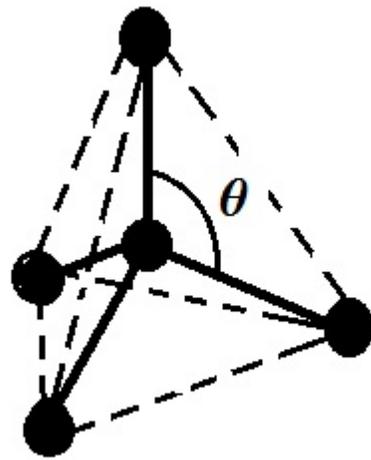


Figura 2