

3ª LISTA DE EXERCÍCIOS

Disciplina: TE069 - Física de Semicondutores

Professor: César Augusto Dartora¹

- 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 σ_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 σ 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?

¹cadartora@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 θ .

c) Minimize a energia potencial, com relação ao ângulo θ 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 -27.2eV (-13.6eV 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.

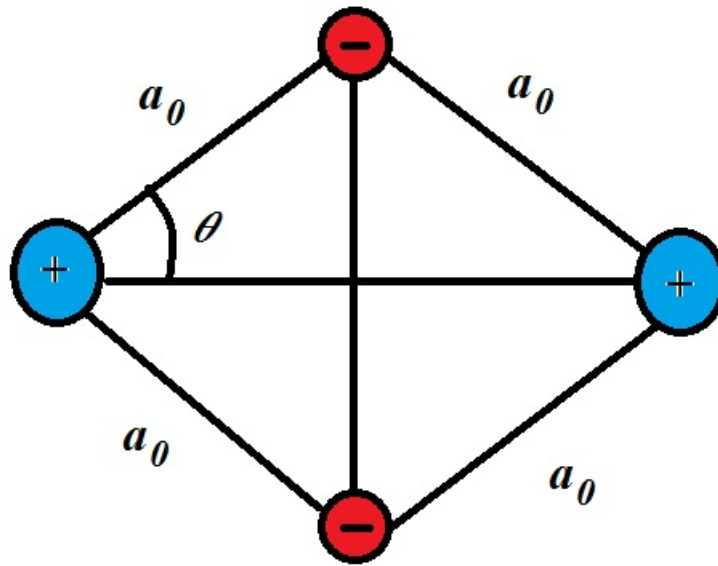


Figura 1

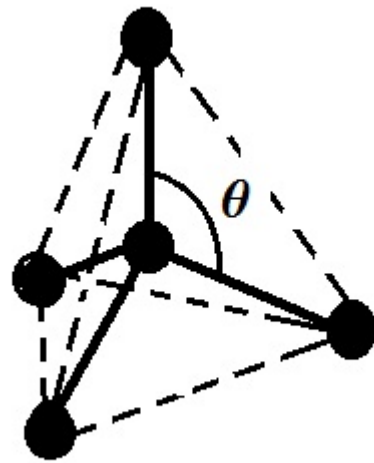


Figura 2