

Universidade de São Paulo
Instituto de Física

Disciplina:

Introdução à Física do Estado Sólido

Professora Responsável:

Lucy Vitória Credidio Assali

São Paulo
2018

Índice

1	Informações gerais	3
2	Introdução	3
3	Resumo do programa	3
4	Bibliografia	3
5	Critério de avaliação	4
6	Critério de aprovação	5
7	Calendário dos feriados escolares	5
8	Calendário das provas gerais	6
9	Calendário das provinhas	6
10	Equipe	6
11	Horário e local das aulas	7
12	Página da disciplina na internet	7
13	Coletânea de exercícios	7
13.1	Estrutura Cristalina	7
13.2	Raios-X e Rede Recíproca	9
13.3	Ligações Cristalinas	11
13.4	Vibrações da Rede, Fônons e Propriedades Térmicas . . .	13
13.5	Gás de Fermi e Elétrons Livres	15
13.6	Teorema de Bloch e Bandas de Energia	16
13.7	Materiais Semicondutores	18
13.8	Superfície de Fermi e Metais	20

1 Informações gerais

Este texto contém informações importantes sobre a disciplina de Introdução à Física do Estado Sólido. Nele estão apresentados o programa da disciplina, a bibliografia recomendada, os critérios de avaliação e de aprovação, o calendário das provas, assim como uma coletânea de exercícios, que foi planejada para auxiliar o aprendizado de todo o conteúdo da disciplina.

2 Introdução

A disciplina de Introdução à Física do Estado Sólido tem um papel importante na formação dos alunos de bacharelado em Física. Esta disciplina introduz conceitos fundamentais sobre a matéria, dentro de um contexto básico que permite entender as idéias fundamentais sobre a física dos materiais como, por exemplo, dos dispositivos eletrônicos envolvidos na dinâmica de nosso dia-a-dia. A disciplina contará com o apoio de um aluno de pós-graduação do IFUSP, que ajudará na manutenção da página da disciplina, na internet, e por eventuais aulas de exercícios.

3 Resumo do programa

1. Estrutura Cristalina
2. Difração de Raios-X e Rede Recíproca
3. Ligações Cristalinas
4. Vibrações da Rede, Fônons e Propriedades Térmicas
5. Gás de Fermi e Elétrons Livres
6. Teorema de Bloch e Bandas de Energia
7. Materiais Semicondutores
8. Superfície de Fermi e Metais
9. Magnetismo

4 Bibliografia

A bibliografia básica do curso é o livro texto:

- *Introdução à Física do Estado Sólido* - Charles Kittel, LTC.

Existem outros dois livros recomendados, que podem ser utilizados como bibliografia ou como complementos ao livro texto. São eles:

- *Solid State Physics* - Gerald Burns, Academic Press
- *Solid State Physics* - Neil W. Ashcroft e N. David Mermin, Cornell University, Saunders College Publishing.

A biblioteca do Instituto de Física dispõe de exemplares desses livros, bem como de outros textos que poderão ser usados como bibliografia complementar.

5 Critério de avaliação

A avaliação será feita através de **Provas Gerais**, **Provas de Exercícios**, ou provinhas, e **Listas de Exercícios** (LE). As provinhas terão duração de 30 minutos e as provas gerais terão duração de 120 minutos.

1. Provas Gerais:

Serão realizadas duas Provas Gerais, **PG₁** e **PG₂**, mais uma Prova Substitutiva, **P_S**.

A **P_S** é uma prova única, no final do semestre, versando sobre toda a matéria.

2. Nota de Exercícios:

Serão realizadas provinhas, em um total de três, e a Nota de Exercícios, **N_E**, resulta da média aritmética das notas obtidas nas provinhas e em uma lista de exercícios para nota. *Não haverá provinha ou lista substitutiva* e a nota das provinhas ou das listas não poderá substituir qualquer nota de prova.

Outras questões que digam respeito ao bom aproveitamento do curso e que não se enquadram dentro das regras acima deverão ser resolvidas pela professora da disciplina.

6 Critério de aprovação

A Média Final, M_F , será calculada da seguinte forma:

$$M_F = 0,4(PG_1 + PG_2) + 0,2N_E$$

de modo que

$$M_F \geq 5 \quad \underline{\text{aprovação}}$$

$$3 \leq M_F < 5 \quad \underline{\text{recuperação}}$$

$$M_F < 3 \quad \underline{\text{reprovação}}$$

O(A) aluno(a) que alcançar frequência mínima às aulas de 70% e média final entre 3,0 (três) e 5,0 (cinco), poderá realizar uma prova de recuperação (P_{Rec}), a qual compreende toda a matéria do semestre e será realizada no mês de julho. Neste caso, a nota final N_F será calculada da seguinte forma:

$$N_F = (M_F + P_{Rec})/2$$

de modo que

$$N_F \geq 5 \quad \underline{\text{aprovação}}$$

$$N_F < 5 \quad \underline{\text{reprovação}}$$

7 Calendário dos feriados escolares

- 23 a 31 de março: Semana Santa. Não haverá aula.
- 21 de abril: Tiradentes. Não haverá aula.
- 30 de abril: Recesso Escolar. Não haverá aula.
- 1º de maio: Dia do Trabalho. Não haverá aula.
- 31 de maio: Corpus Christi. Não haverá aula.
- 1 e 2 de junho: Recesso Escolar. Não haverá aula.

8 Calendário das provas gerais

- 1^a Prova Geral (PG_1): 09 de maio (quarta-feira)
- 2^a Prova Geral (PG_2): 27 de junho (quarta-feira)
- Prova Substitutiva (P_S): 04 de julho (quarta-feira)
- Prova de Recuperação (P_{Rec}): 11 de julho (quarta-feira)

9 Calendário das provinhas

- 1^a provinha (p_1): 19 de março (segunda-feira)
- 2^a provinha (p_2): 18 de abril (quarta-feira)
- 3^a provinha (p_3): 04 de junho (segunda-feira)

As provinhas serão realizadas na sala de aula nos primeiros 30 minutos da aula e, em seguida, haverá aula normalmente.

10 Equipe

Lucy Vitória Credidio Assali

Professora associada do Departamento de Física dos Materiais e Mecânica. Desenvolve pesquisa na área de propriedades físicas de materiais e nanomateriais semicondutores através de simulações computacionais que utilizam métodos de primeiros princípios.

Escritório: Edifício Alessandro Volta, Bloco C, sala 210.

Fone: 3091-7041

e-mail: lassali@if.usp.br

Bruno Bueno Ipaves Nascimento

Aluno de mestrado no Departamento de Física dos Materiais e Mecânica. Desenvolve pesquisa teórica na área de propriedades de materiais bidimensionais do tipo grafeno com adsorção de íons de Li. Este estudo tem como objetivo estudar a possibilidade de utilização destes sistemas como ânodos de baterias.

Escritório: Edifício Alessandro Volta, Bloco C, sala 202.

Fone: 3091-7015

e-mail: ipaves@if.usp.br

11 Horário e local das aulas

- 2^{as} das 21:00 às 23:00h
- 4^{as} das 19:00 às 21:00h

Local: sala 211 do Edifício Principal - Ala Central

12 Página da disciplina na internet

A disciplina contará com uma página na internet, onde diversas informações, além das contidas neste livreto, estarão anunciadas, tais como alterações de datas de provas, notas, gabaritos, etc. Para acessá-la entre na página <http://disciplinas.stoa.usp.br/course/view.php?id=210> do STOA. É importante consultá-la periodicamente.

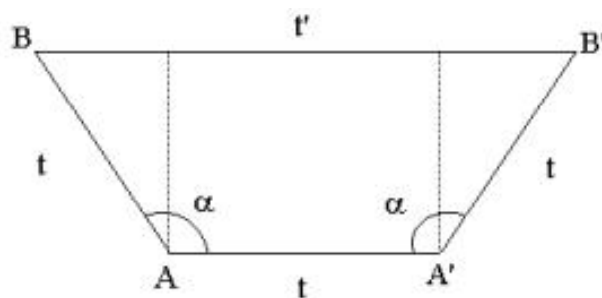
ATENÇÃO: Para ter acesso à página da disciplina é necessário acessar o site <http://disciplinas.stoa.usp.br/> e fazer o login para que os e-mails e avisos referentes à disciplina possam ser recebidos.

13 Coletânea de exercícios

13.1 Estrutura Cristalina

1. Mostre que:
 - (a) As redes monoclinica de corpo centrado e monoclinica de bases centradas são equivalentes.
 - (b) Uma rede cúbica de bases centradas é equivalente a uma rede tetragonal simples.
2. Escreva os vetores primitivos e o volume da célula primitiva de uma rede ortorrômbica de faces centradas.
3. Considere uma rede monoclinica tal que $\beta = 60^\circ$. Escreva os vetores primitivos e o volume da rede monoclinica de bases centradas.
4. Considere uma estrutura *hcp*. Mostre que:
 - (a) A razão ideal c/a vale $(8/3)^{1/2}$;
 - (b) O fator de empacotamento é 0,74.

5. O ferro, cujo peso atômico é $A = 56$, tem rede de Bravais CCC com densidade 7900 kg m^{-3} . Calcule o parâmetro de rede a e o espaçamento atômico. Assumindo que os átomos possam ser imaginados como esferas rígidas, estime o raio atômico do ferro.
6. O sódio se transforma de uma rede CCC para uma estrutura *hcp* ao redor de uma temperatura de 23K. Assumindo que a densidade (número de átomos por unidade de volume) se mantém fixa durante a transição, encontre o valor do parâmetro de rede a da fase hexagonal sabendo que na fase cúbica $a = 4,23 \text{ \AA}$ e que a razão c/a apresenta o valor ideal.
7. Considere a ilustração abaixo, onde A e A' são dois pontos da rede separados por uma translação t da rede. Seja $\mathbf{R}$ uma operação rotacional de simetria. Aplicando $\mathbf{R}$, ou o seu inverso $\mathbf{R}^{-1}$, em cada um dos pontos A e A', obtemos os pontos B e B', sendo estes separados entre si por uma distância t' . Como $\mathbf{R}$ é uma operação simétrica, B e B' também devem ser pontos da rede. Com isso, t' deve ser um múltiplo inteiro de t . A partir dessas considerações, mostre que as rotações de simetria permitidas são 2π , π , $\frac{2\pi}{3}$, $\frac{\pi}{2}$ e $\frac{\pi}{3}$.

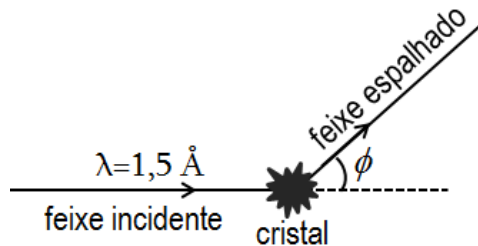


8. Encontre as células de Wigner-Seitz dos 4 seguintes tipos de redes de Bravais bidimensionais: rede oblíqua; rede quadrada; rede hexagonal e rede retangular.
9. Considere a rede do diamante, cujo parâmetro de rede é a . Determine:
 - (a) O número de átomos na célula unitária ou convencional e seus vetores posição;
 - (b) O número de átomos na célula primitiva e seus vetores posição;
 - (c) O número de primeiros, segundos e terceiros vizinhos, de um átomo de carbono na rede, e suas distâncias;

- (d) O fator de empilhamento desta estrutura;
- (e) O ângulo entre quaisquer duas linhas (ligações) que unem um sítio da rede com seus quatro primeiros vizinhos e mostre que ele é $109^\circ 28'$ ($\cos^{-1}(-1/3)$).

13.2 Raios-X e Rede Recíproca

10. Três diferentes espécies de cristais cúbicos monoatômicos foram analisados utilizando-se uma câmara de Debye-Sherrer, conforme a figura.



Sabe-se que uma das amostras tem rede CFC, uma tem rede CCC e a outra possui a estrutura do diamante. As posições aproximadas dos primeiros quatro anéis de difração, em cada caso, são dados na tabela.

Valores de ϕ para cada uma das amostras

A	B	C
42,2°	28,8°	42,8°
49,2°	41,0°	73,2°
72,0°	50,8°	89,0°
87,3°	59,6°	115,0°

- (a) Identifique as estruturas cristalinas A, B e C;
- (b) Se o feixe incidente tem comprimento de onda $\lambda = 1,5 \text{ \AA}$, encontre o parâmetro de rede para cada um dos cristais.
11. Mostre que um vetor de translação da rede recíproca é perpendicular a um plano (h, k, ℓ) do cristal.
12. Considere as redes CCC e CFC, cada uma delas com parâmetro de rede a . Construa suas redes recíprocas e determine seus parâmetros de rede e seus volumes, em função de a .

13. Os vetores de translação primitivos da rede espacial hexagonal são dados por:

$$\vec{a}_1 = \frac{\sqrt{3}a}{2} \hat{i} + \frac{a}{2} \hat{j}; \quad \vec{a}_2 = -\frac{\sqrt{3}a}{2} \hat{i} + \frac{a}{2} \hat{j}; \quad \vec{a}_3 = c \hat{k}.$$

- (a) Determine os vetores primitivos de translação da rede recíproca, mostre que ela também é uma rede hexagonal, e encontre o ângulo entre $\vec{b}_1$ e $\vec{b}_2$ (vetores da base do hexágono);
 - (b) Se, na rede direta, a razão c/a é a ideal, qual é o valor dessa razão para a rede recíproca?
 - (c) Descreva ou desenhe a primeira zona de Brillouin da rede hexagonal.
14. Mostre que se o volume da célula primitiva de um cristal, na rede direta, é V_c , então o volume da primeira zona de Brillouin é $\frac{(2\pi)^3}{V_c}$.
15. O cristal de cloreto de sódio (NaCl) é uma rede de Bravais cúbica de face centrada, de parâmetro de rede a , com dois átomos na base. Considere os planos de Miller (100), (110) e (111) do cristal (os índices se referem aos eixos cartesianos ortogonais). Determine:
- (a) As distâncias entre planos cristalinos consecutivos em cada família de planos paralelos;
 - (b) O tipo, o número e a distância dos primeiros e segundos vizinhos, considerando apenas os átomos no plano (111), como se fosse um cristal bidimensional;
 - (c) A densidade planar de átomos (número de átomos por cm^2) de Na e de Cl em cada um dos planos indicados. Expresse o resultado em termos do parâmetro de rede a ;
 - (d) A primeira zona de Brillouin da rede bidimensional proposta no item (b).
16. Considere uma rede bidimensional quadrada.
- (a) Determine os vetores de translação primitivos da rede recíproca;
 - (b) Construa, em papel milimetrado, as 4 primeiras zonas de Brillouin.

17. O cristal de arseneto de gálio (GaAs) é uma estrutura cúbica de face centrada, de parâmetro de rede a , com dois átomos na base, chamada de estrutura cristalina blenda ou *zinc-blend*. Determine:
- (a) A distância entre planos (111) de átomos de Ga mais próximos;
 - (b) A distância entre planos (111) de átomos de As mais próximos;
 - (c) A distância entre planos (111) de átomos de Ga e As mais próximos (bicamadas);
 - (d) O fator de estrutura do GaAs, assumindo que sua estrutura cristalina é descrita por uma célula cúbica simples contendo 8 átomos na base e que os fatores atômicos dos átomos de Ga e As sejam iguais, ou seja, $f_{\text{Ga}} = f_{\text{As}}$. Ache os zeros (valores possíveis) do fator de estrutura e mostre que as reflexões permitidas satisfazem a relação $h + k + \ell = 4n$, onde todos os índices são pares e n é um inteiro qualquer, ou, então, todos os índices são ímpares.
 - (e) O fator de estrutura se considerarmos, agora, a rede primitiva do GaAs (CFC com 2 átomos por célula). Encontre seus zeros, compare este resultado com aquele encontrado no item (d), onde foi utilizada a célula convencional cúbica simples, e explique porque eles são diferentes (o fenômeno físico é o mesmo!).
18. A densidade eletrônica do átomo de hidrogênio, em seu estado fundamental, é:

$$n(r) = \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-\left(\frac{2r}{a_0}\right)},$$

onde a_0 é o raio de Bohr. Mostre que o fator de forma atômico é dado por:

$$f = \frac{16}{(4 + G^2 a_0^2)^2}.$$

13.3 Ligações Cristalinas

19. Usando o potencial de Lennard-Jones, calcule a energia de coesão do neon, $U(R_0)$, onde R_0 é a posição de equilíbrio, nas estruturas cúbica de corpo centrado (CCC) e cúbica de faces centradas (CFC). As somas da rede, para essas duas estruturas são:

Estrutura CCC:

$$\sum_{j \neq i} q_{ij}^{-12} = 9,1142$$

$$\sum_{j \neq i} q_{ij}^{-6} = 12,2533$$

Estrutura CFC:

$$\sum_{j \neq i} q_{ij}^{-12} = 12,1319$$

$$\sum_{j \neq i} q_{ij}^{-6} = 14,4539$$

Qual dessas estruturas é a mais estável? Porque?

20. O módulo da compressibilidade volumétrica da forma cristalina do He é $B = 6 \times 10^8 \text{ J/m}^3$. Qual a variação percentual das dimensões da célula $\left(\frac{dV}{V}\right)$ quando comprimimos o He a 25 atmosferas?
21. Considere um cristal iônico unidimensional, constituído de $2N$ íons com cargas alternadas $\pm q$, cuja energia potencial repulsiva entre vizinhos mais próximos seja dada por

$$U(r) = \frac{A}{r^n}, \quad \text{com } n \text{ inteiro.}$$

- (a) Mostre que, na separação de equilíbrio R_0 , a energia de coesão, no sistema CGS, é dada por:

$$U(R_0) = -\frac{2Nq^2 \ln 2}{R_0} \left\{ 1 - \frac{1}{n} \right\}.$$

- (b) Suponha, agora, que o cristal seja comprimido de forma que sua separação de equilíbrio R_0 se modifique muito pouco, passando a ser $R_0(1 - \delta)$, onde $\delta \ll 1$. Mostre que o trabalho realizado nessa compressão possui o termo principal dado por

$$\frac{C\delta^2}{2},$$

onde, no sistema CGS,

$$C = \frac{(n-1)q^2 \ln 2}{R_0}.$$

22. Considere, no modelo de ligação iônica, um potencial repulsivo do tipo

$$U(r) = z \lambda e^{-(r/\rho)}.$$

Sabendo que para o NaCl: $\alpha = 1,75$, $a = 5,63 \text{ \AA}$ e $\rho = 0,1R_0$, onde R_0 é a posição de equilíbrio do cristal, calcule:

- (a) A energia de coesão, em eV;
- (b) O módulo da compressibilidade volumétrica (*bulk modulus*);
- (c) O coeficiente de expansão térmica α_T .

23. Considere, no modelo de ligação iônica, um potencial repulsivo do tipo

$$U(r) = z \frac{A}{r^{12}},$$

no lugar do potencial do tipo exponencial. Calcule a energia de coesão, em eV, para o NaCl, sabendo que $\alpha = 1,75$ e $a = 5,63 \text{ \AA}$.

24. Calcule a energia de coesão do KCl supondo que ele tenha a estrutura cúbica análoga à do ZnS (*zinc-blend*). Compare com o valor calculado para o KCl na sua estrutura correta, que é a do NaCl, sabendo que $\lambda = 2,05 \times 10^{-8} \text{ erg}$, $\rho = 0,326 \text{ \AA}$ e $\alpha = 1,6381$.
25. A partir de valores experimentais da energia de coesão e da distância entre vizinhos mais próximos, determine o módulo da compressibilidade volumétrica do LiF. Compare com o valor observado.

13.4 Vibrações da Rede, Fônons e Propriedades Térmicas

26. Considere uma rede unidimensional com constante de rede a e com uma base de 1 átomo por célula primitiva. Os átomos têm massa M e estão conectados entre si por molas de constante α . Supondo interação somente entre os primeiros vizinhos, encontre:

- (a) A equação de movimento para essa rede e a relação de dispersão, mostrando que ela é dada por

$$\omega(k) = \omega_m \left| \sin \left(\frac{ka}{2} \right) \right|, \text{ onde } \omega_m = \sqrt{\frac{4\alpha}{M}};$$

- (b) Os valores da frequência $\omega(k)$ no limite $k \rightarrow 0$ e para $k = \pm \frac{\pi}{a}$, esboçando o gráfico de $\omega(k)$ em função de k ;

- (c) A relação entre os deslocamentos dos átomos primeiros vizinhos para os valores de k nos limites do item anterior;
- (d) A velocidade do som e o valor da frequência de Debye ω_D ;
- (e) A densidade de modos;
- (f) A forma geral da energia interna U em função da temperatura;
- (g) O comportamento da energia interna U nos limites de altas temperaturas ($T \gg \theta_D$) e no de baixas temperaturas ($T \ll \theta_D$), estabelecendo o comportamento correspondente da capacidade térmica C_V .

27. Considere uma rede linear com uma base de 2 átomos por célula primitiva, cuja constante de rede é a . Os átomos desta cadeia têm massa M e estão conectados por molas cujas constantes são, alternadamente, α e β . Encontre, supondo somente interação entre primeiros vizinhos:

- (a) As equações de movimento para essa rede e a relação de dispersão;
- (b) Os valores de $\omega(k)$ no limite $k \rightarrow 0$ e para $k = \pm \frac{\pi}{a}$, esboçando o gráfico de $\omega(k)$ em função de k .
- (c) O calor específico desta rede no limite $k \rightarrow 0$ (aproximação de Debye);
- (d) A capacidade térmica na aproximação de Debye, analisando seus limites para $\theta_D \ll T$ e para $\theta_D \gg T$.

28. Seja uma rede cristalina bidimensional quadrada com área a^2 , com uma base de 1 átomo, de massa M , por célula primitiva.

- (a) Supondo somente interação entre primeiros vizinhos, mostre que a relação de dispersão é:

$$\omega(k) = \left\{ \frac{2\alpha}{M} \left[2 - \cos(k_x a) - \cos(k_y a) \right] \right\}^{1/2},$$

verificando que no limite $k \rightarrow 0$ a lei de dispersão é $\omega(k) = v k$ com $k = (k_x^2 + k_y^2)^{1/2}$ e $v = \text{constante}$;

- (b) Calcule a densidade de modos no limite $k \rightarrow 0$;
- (c) Calcule a capacidade térmica na aproximação de Debye, obtendo e analisando seu valor nos limites $\theta_D \ll T$ e $\theta_D \gg T$.

29. Considere um cristal isotrópico cúbico de parâmetro de rede a e volume V . Utilizando a aproximação de Debye:

- (a) Determine a densidade de modos $D(\omega)$;
- (b) Determine a frequência de Debye ω_D ;
- (c) Mostre que a energia térmica do sistema é dada por

$$U(T) = 9Nk_B T \left\{ \frac{T}{\theta_D} \right\}^3 \int_0^{\theta_D/T} \frac{x^3 dx}{e^x - 1},$$

$$\text{onde } \theta_D = \frac{\hbar\omega_D}{k_B} \text{ e } x = \beta\hbar\omega = \frac{\hbar\omega}{k_B T};$$

- (d) Encontre a expressão de C_V para $\theta_D \gg T$;
- (e) Encontre a expressão de C_V para $\theta_D \ll T$;
- (f) Quais as variações, em função de T , que você esperaria obter para C_V , nos limites dos itens (d) e (e), se a rede fosse bidimensional quadrada? Por que?

30. Considere o ramo óptico de um cristal em três dimensões. Nas vizinhanças de $k = 0$, a relação de dispersão pode ser aproximada por

$$\omega(k) = \omega_0 \left(1 - \frac{k^2}{k_0^2} \right),$$

onde ω_0 e k_0 são constantes.

- (a) Mostre que a contribuição deste ramo para a densidade de modos, para $\omega < \omega_0$, é:

$$D(\omega) = \frac{V}{(2\pi)^2} \left[\frac{k_0}{\omega_0} \right]^3 \left[\frac{\omega_0 - \omega}{\omega_0} \right]^{1/2}.$$

- (b) Faça um esboço da função $D(\omega)$ nas vizinhanças de ω_0 .

13.5 Gás de Fermi e Elétrons Livres

31. Considere um gás de elétrons livres em duas dimensões, onde a densidade eletrônica é $n = N/A$, onde N é o número total de estados e A é a área do cristal. Determine:
- (a) A densidade de estados $D(\varepsilon)$ e faça um gráfico de $D(\varepsilon) \times \varepsilon$;
 - (b) A energia cinética máxima de um elétron no estado fundamental ($T = 0\text{K}$), em função de n ;

- (c) A energia cinética média no estado fundamental, em função da energia de Fermi (ε_F) e N ;
 - (d) A expressão para o potencial químico $\mu(T)$, verificando que seu valor no limite $\varepsilon_F \gg k_B T$ é ε_F e que para $T \rightarrow 0$ temos que $\mu \rightarrow \varepsilon_F$;
 - (e) A expressão para o calor específico a volume constante (C_V).
32. Considere um gás de elétrons livres em três dimensões, onde a densidade eletrônica é dada por $n = N/V$, onde N é o número total de estados e V é o volume do cristal.
- (a) Encontre a densidade de estados $D(\varepsilon)$;
 - (b) Determine a energia cinética máxima de um elétron no estado fundamental ($T = 0\text{K}$), em função de n ;
 - (c) Encontre a energia cinética média no estado fundamental em função da energia de Fermi (ε_F) e N ;
 - (d) Mostre que, no estado fundamental ($T = 0\text{K}$), a relação entre a pressão e volume do gás é:

$$p = \frac{2E}{3V}$$

- (e) Mostre que, no estado fundamental ($T = 0\text{K}$), o módulo da compressibilidade volumétrica (B) é dado por:

$$B = \frac{10E}{9V} = \frac{5p}{3}$$

- (f) Determine o valor aproximado de C_V (calor específico à volume constante) deste cristal, devido aos elétrons, no limite $\varepsilon_F \gg k_B T$, supondo $\mu = \varepsilon_F$

13.6 Teorema de Bloch e Bandas de Energia

33. Seja $\Psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ uma autofunção do operador de translação da rede $T_{\vec{\ell}}$, onde $\vec{\ell}$ é um vetor de translação da rede. Sabendo que $T_{\vec{\ell}}f(\vec{r}) = f(\vec{r} + \vec{\ell})$, mostre que:
- (a) $T_{\vec{\ell}}H(\vec{r}) = H(\vec{r})T_{\vec{\ell}}$, ou seja, que os operadores de translação e hamiltoniano comutam. (Sugestão: supor que a energia potencial, no operador hamiltoniano, é periódica, ou seja, $U(\vec{r}) = U(\vec{r} + \vec{\ell})$);

- (b) $T_{\vec{\ell}} T_{\vec{\ell}'} = T_{\vec{\ell}'} T_{\vec{\ell}} = T_{\vec{\ell} + \vec{\ell}'}$;
- (c) $T_{\vec{\ell}} \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \Psi_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{\ell}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{\ell}} \Psi_{\vec{k}}(\vec{r})$, onde $\vec{k}$ é um vetor do espaço recíproco;
- (d) Se $\vec{k}$ for um vetor de translação do espaço recíproco, tal que $\vec{k} = \vec{G}$, então $\Psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ é periódica;
- (e) $\Psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ pode ser escrita na forma $\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} u_{\vec{k}}(\vec{r})$, onde a função $u_{\vec{k}}(\vec{r})$ é periódica, ou seja, $u_{\vec{k}}(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{\ell})$.

34. Considere uma rede retangular onde os vetores primitivos são $\vec{a}_1 = a\hat{i}$ e $\vec{a}_2 = 2a\hat{j}$. Usando a teoria de faixas no modelo do gás de elétrons livres:

- (a) Escreva a expressão para os valores da energia deste sistema, normalizadas a $\frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$ (ϵ'), na aproximação de rede vazia, em função dos vetores de translação da rede recíproca $\vec{G} = m_x \vec{b}_1 + m_y \vec{b}_2$;
- (b) Represente a primeira zona de Brillouin e indique quais as direções ΓL e ΓX . Quais as relações entre $\xi_x = k_x/[\pi/a]$ e $\xi_y = k_y/[\pi/a]$ ao longo das direções ΓL e ΓX ?
- (c) Dê a expressão da energia, normalizada a $\frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$ (ϵ'), para a direção ΓL , nesta aproximação;
- (d) Esboce, no esquema de zona reduzida, as faixas de energia correspondentes a m_x e m_y variando entre -1 e 1, para a direção ΓL .

35. Considere uma rede quadrada de lado a e a teoria de faixas. Os vetores de translação da rede recíproca são $\vec{G} = m_x \vec{b}_1 + m_y \vec{b}_2$.

- (a) Determine as faixas de energia nas direções ΓL , ΓX e LX no modelo do gás de elétrons livres. Esboce um gráfico de ϵ' em função de ξ . Ache os índices de faixas n e indique as degenerescências.
- (b) Explique porque para $m_x = 0$ e $m_y = -1$ temos os índices $n = 3$ e $n = 4$ para a direção ΓX e os índices $n = 5$ e $n = 6$ para a direção ΓL . Qual a degenerescência para o ponto na direção ΓL em que dois planos de Bragg se cruzam?
- (c) Considere, agora, que existe um potencial cristalino dado por:

$$U(x, y) = -4U_0 \cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \cos\left(\frac{2\pi y}{a}\right).$$

Aplique a equação secular e o modelo de elétrons quase-livres para encontrar a largura da faixa proibida no ponto $\vec{k} = \left(\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\right)$ (ponto L), onde $\varepsilon'_L = 10$.

36. Mostre, esquematicamente, dentro da teoria de faixas e no modelo do elétron quase-livre: um metal, um isolante, um semimetal e um semicondutor ($T = 0\text{K}$).

13.7 Materiais Semicondutores

37. Descreva as características básicas de:
- (a) Um material semicondutor;
 - (b) Um semicondutor de gap direto;
 - (c) Um semicondutor de gap indireto.
38. Dê exemplos de semicondutores do tipo IV, do tipo III-V e do tipo II-VI, explicando esta nomenclatura.
39. Defina semicondutor intrínseco e dopado. O que são semicondutores do tipo- n e do tipo- p ? Dê exemplos.
40. Descreva as 5 características dos buracos e a teoria da massa efetiva.
41. Calcule o número de portadores em um semicondutor intrínseco e mostre que o potencial químico é dado por:

$$\mu_i(T) = \frac{E_g}{2} + \frac{3}{4}k_B T \ln(m_V^*/m_C^*)$$

42. Mostre que a energia de ionização e o raio do estado ligado de uma impureza aceitadora são dados, respectivamente, por:

$$E_a - E_C = \frac{e^4 m_V^*}{2\varepsilon^2 \hbar^2},$$

$$r_a = \frac{\varepsilon \hbar^2}{m_V^* e^2}.$$

Justifique cada passagem em detalhes.

43. (a) Explique qualitativamente, usando palavras e gráficos, porque o nível de Fermi de um semiconductor do tipo- n está mais próximo da banda de condução do que da de valência, enquanto que em um do tipo- p ocorre o inverso;
- (b) Explique qualitativamente, usando palavras e gráficos, como o nível de Fermi varia com a temperatura em um semiconductor do tipo- n .
44. Uma amostra de Si é dopada tipo- n com 10^{17} átomos/cm³. Supondo que todas as impurezas estejam ionizadas:
- (a) Deduza a expressão do potencial químico extrínseco em função da temperatura e do potencial químico intrínseco;
- (b) Calcule a concentração de portadores presentes na amostra para $T = 300\text{K}$ e $T = 1000\text{K}$, discutindo para cada caso a natureza do semiconductor, se intrínseco ou extrínseco;
45. Considere um material semiconductor não degenerado dopado com N_d impurezas doadoras e N_a impurezas aceitadoras. Considerando o limite onde todas as impurezas estão ionizadas, mostre que

$$N_d - N_a = 2n_i \sinh\left(\frac{\mu - \mu_i}{k_B T}\right),$$

onde μ e μ_i são os potenciais químicos do material dopado e intrínseco, respectivamente, e n_i é a concentração de portadores no caso intrínseco.

46. Considere um material semiconductor não degenerado dopado com N_d impurezas doadoras e N_a impurezas aceitadoras. Considerando o limite onde todas as impurezas estão ionizadas, pede-se:
- (a) A expressão para n_c e p_v em termos de n_i^2 , onde n_c é a concentração de elétrons na banda de condução, p_v é a concentração de buracos na banda de valência e n_i é a concentração de portadores intrínsecos;
- (b) O potencial químico em função da concentração de doadores e aceitadores nos limites $n_i^2 \gg (N_a - N_d)^2$ e $n_i^2 \ll (N_a - N_d)^2$.
47. Uma junção $p-n$ pode agir como um retificador, ou seja, uma corrente alta flui através dele se aplicarmos uma voltagem, através da junção, em um sentido, mas se ela for aplicada no sentido oposto, apenas uma

corrente muito baixa fluirá. Discuta e demonstre matematicamente esta afirmação.

13.8 Superfície de Fermi e Metais

48. A estrutura eletrônica do átomo de Cu é $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^1$. O cristal de cobre tem massa molar de 63,54 g/mol e sua densidade é de 8,96 g/cm³ a 300K. A estrutura cristalina deste cristal monoatômico é CFC. Pede-se:
- (a) Calcule o parâmetro de rede do cobre;
 - (b) Considerando os átomos como esferas rígidas, calcule o raio atômico do Cu no cristal;
 - (c) Ache o espaçamento entre os planos adjacentes nas direções (111) e (100);
 - (d) Explique qual o comportamento que se espera do cristal de Cu.