

Universidade de São Paulo
Instituto de Física

Coletânea de Exercícios
Introdução à Física do Estado Sólido

Professora Responsável:
Lucy Vitória Credidio Assali

São Paulo
2º Semestre/2018

Índice

1	Estrutura Cristalina	3
2	Raios-X e Rede Recíproca	5
3	Ligações Cristalinas	8
4	Vibrações da Rede, Fônons e Propriedades Térmicas	10
5	Gás de Fermi e Elétrons Livres	12
6	Teorema de Bloch e Bandas de Energia	13
7	Materiais Semicondutores	15
8	Superfície de Fermi e Metais	17

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.

Duas redes são equivalentes quando pode-se utilizar ambas para representar a mesma distribuição de pontos no espaço. Como consequência, apenas uma delas é escolhida como uma das 14 redes de Bravais.

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.

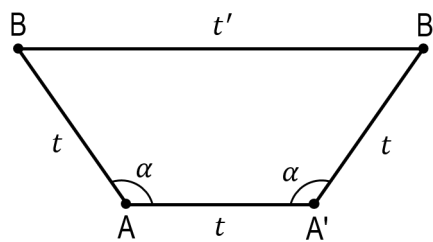
4. Considere uma estrutura *hcp*. Mostre que:

- (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.

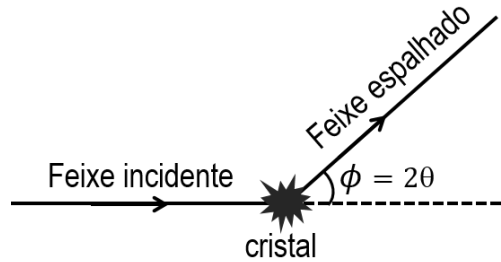
7. Considere a ilustração abaixo, onde A e A' são dois pontos da rede separados por uma translação t da rede. Seja $\mathbf{R}$ uma operação de simetria rotacional. Aplicando $\mathbf{R}$, ou o seu inverso $\mathbf{R}^{-1}$, em cada um dos pontos A e A', obtemos os pontos B e B', sendo estes separados 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 só rotações de $2\pi/n$, com $n = 1, 2, 3, 4$ e 6 são compatíveis com as operações de translação da rede.



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:
- O número de átomos na célula unitária ou convencional e seus vetores posição;
 - O número de átomos na célula primitiva e seus vetores posição;
 - O número de primeiros, segundos e terceiros vizinhos, de um átomo de carbono na rede, e suas distâncias em função de a ;
 - O fator de empilhamento desta estrutura;
 - O ângulo entre quaisquer duas linhas (ligações) que unem um sítio da rede com seus quatro primeiros vizinhos e mostre que ele é $109^\circ 28'$ ($\cos^{-1}(-1/3)$).

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 cristalina do diamante. As posições aproximadas dos primeiros quatro anéis de difração, em cada caso, são dados na tabela, para um feixe incidente com comprimento de onda $\lambda = 1,5 \text{ \AA}$.

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) 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, utilizando a célula convencional cúbica simples, que contém 8 átomos na base, e assumindo que os fatores atômicos dos átomos de Ga e As sejam iguais, ou seja, $f_{\text{Ga}} = f_{\text{As}} = f$. Ache os zeros (valores possíveis) do fator de estrutura e mostre que as reflexões permitidas satisfazem as relações $h + k + \ell = 4n$ ou $h + k + \ell = 2n + 1$ onde n é um inteiro. (obs.: Estas duas relações obrigam que os índices h, k , e ℓ sejam todos pares ou todos ímpares).
 - (e) O fator de estrutura se considerando, agora, a rede primitiva do GaAs (CFC com uma base de 2 átomos). Encontre seus zeros, compare este resultado com aquele encontrado no item (d), onde foi utilizada a célula convencional cúbica simples. Os resultados são diferentes? Explique sua resposta. (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:

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

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:

$$\text{Estrutura CCC: } \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \sum_{j \neq i} q_{ij}^{-12} = 9,1142 \\ \sum_{j \neq i} q_{ij}^{-6} = 12,2533 \end{array} \right.$$

$$\text{Estrutura CFC: } \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \sum_{j \neq i} q_{ij}^{-12} = 12,1319 \\ \sum_{j \neq i} q_{ij}^{-6} = 14,4539 \end{array} \right.$$

Qual dessas estruturas é a mais estável? Porque?

20. 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

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

- (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 $\delta \ll 0$. Mostre que o trabalho realizado nessa compressão possui o termo principal dado por

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

onde, no sistema CGS,

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

21. 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 ($1 \text{ erg} = 6,24 \times 10^{11} \text{ eV}$);
(b) O módulo da compressibilidade volumétrica (*bulk modulus*);
22. 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 por par de íons, em eV, para o NaCl, sabendo que $\alpha = 1,75$ e $a = 5,63 \text{ \AA}$.

23. O LiF tem a estrutura cristalina do NaCl, onde a distância entre primeiros vizinhos é $R_0 = 2,0 \text{ \AA}$ e a densidade de energia de coesão é $1,7 \times 10^{-11} \text{ erg}$. Sabendo que o parâmetro de alcance da repulsão é

$\rho = 0,15R_0$, determine o módulo da compressibilidade volumétrica do LiF. Compare com o valor observado de $B_0 = 62$ GPa.

4 Vibrações da Rede, Fônons e Propriedades Térmicas

24. 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

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

- (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 .

25. 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 $\theta_D \gg T$.
26. 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 $\theta_D \gg T$.
27. 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?
28. Considere o ramo óptico de um cristal em três dimensões. Nas vizinhanças de $k = 0$, a relação de dispersão pode ser aproximada por

$$\omega(k) = \omega_0 \left(1 - \frac{k^2}{k_0^2} \right), \quad \text{onde } \omega_0 \text{ e } k_0 \text{ são constantes.}$$

- (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 .

5 Gás de Fermi e Elétrons Livres

29. 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).
30. 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_0) é dado por:

$$B_0 = \frac{10E}{9V} = \frac{5p}{3}$$

- (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 $\mu = \varepsilon_F$

6 Teorema de Bloch e Bandas de Energia

31. 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, $u_{\vec{k}}(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{\ell})$.
32. 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 as direções $\overline{\Gamma X}$, $\overline{\Gamma L}$ e $\overline{XL}$; Quais as relações entre $\xi_x = k_x/(\pi/a)$ e $\xi_y = k_y/(\pi/a)$ ao longo das direções $\overline{\Gamma X}$, $\overline{\Gamma L}$ e $\overline{XL}$?
- (c) Dê a expressão da energia, normalizada a $\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$ (ϵ'), para a direção $\overline{\Gamma L}$, nesta aproximação;
- (d) Esboce as faixas de energia correspondentes a m_x e m_y variando entre -1 e 1, para a direção $\overline{\Gamma L}$.
33. 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 $\overline{\Gamma X}$, $\overline{\Gamma L}$ e $\overline{XL}$ 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 $\overline{\Gamma X}$ e os índices $n = 5$ e $n = 6$ para a direção $\overline{\Gamma L}$. Qual a degenerescência para o ponto na direção $\overline{\Gamma L}$ em que dois planos de Bragg se cruzam?

- (c) Considere, que existe um potencial cristalino perturbativo 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 $\varepsilon'_L = 10$.

- (d) Considere, agora, que o potencial cristalino perturbativo seja dado por:

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

Determine o valor do gap no ponto X de mais baixa energia.

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

7 Materiais Semicondutores

35. Descreva as características básicas de:

- (a) Um material semicondutor;
- (b) Um semicondutor de gap direto;
- (c) Um semicondutor de gap indireto.

36. Dê exemplos de semicondutores do tipo IV, do tipo III-V e do tipo II-VI, explicando esta nomenclatura.

37. Defina semicondutor intrínseco e dopado. O que são semicondutores do tipo- n e do tipo- p ? Dê exemplos.

38. Descreva as 5 características dos buracos e a teoria da massa efetiva.

39. Calcule a densidade de portadores em um semicondutor intrínseco e mostre que o potencial químico é dado por:

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

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

$$E_A - E_C = \frac{e^4 m_V^*}{2\varepsilon^2 \hbar^2} \quad \text{e} \quad a_A = \frac{\varepsilon \hbar^2}{m_V^* e^2}.$$

Justifique cada passagem em detalhes.

41. (a) Explique qualitativamente, usando palavras e gráficos, porque a posição do nível de Fermi de um semicondutor do tipo- n está mais próxima do fundo da banda de condução do que do topo da banda de valência, enquanto que em um do tipo- p ocorre o inverso;
- (b) Explique qualitativamente, usando palavras e gráficos, como a posição do nível de Fermi varia com a temperatura em um semicondutor do tipo- n .
42. 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 semicondutor, se intrínseco ou extrínseco;
43. Considere um material semicondutor 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.

44. 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 $n_i^2 \ll (N_a - N_d)^2$.
45. 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.

8 Superfície de Fermi e Metais

46. 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.