

Lista de Exercícios IV

1. (problema 1, cap. 5, Ibach&Luth, 3a. ed.) Calcule a densidade de estados e o calor específico para altas e baixas temperaturas para um meio contínuo elástico em uma e duas dimensões. Você pode visualizar algum sistema que possa corresponder fisicamente a essa situação?
2. (problema 4, cap.5, Ibach&Luth, 3a. ed.) Calcule e faça um gráfico da velocidade de fase e de grupo dos fônons para uma cadeia diatômica linear com razão entre as massas de 1:5. Considere as constante de mola idênticas.
3. (problema 5, cap. 5, Ibach&Luth, 3a. ed.) Mostre que a equação de movimento para um oscilador anarmônico

$$M\ddot{u} + ku - \frac{1}{2}gu^2 = 0$$

pode ser resolvida aproximadamente por uma solução que considera múltiplos da frequência harmônica, $\omega_0 = \sqrt{k/M}$:

$$u = \sum_{n=1}^{\infty} a_n e^{in\omega_0 t}$$

O decaimento dos fônons, isso é, sua perda de energia, ocorre por meio dos termos de ordem superior na expansão do potencial de interação entre os íons. Na descrição por fônons, isso corresponde a colisão entre fônons. Discuta esse processo a luz do resultado obtido.

4. (problema 6, Cap. 5, Ibach&Luth, 3a. ed.) Calcule a expansão térmica para um oscilador anarmônico seguindo o mesmo procedimento do problema anterior. A variação da frequência do deslocamento u_{est} pode ser encontrada utilizando o *ansatz* $u(t) = u_{est} + u_1 \sin \omega t$.
5. (problema 3, cap. 13, Marder) O espalhamento de um fônon por neutrons pode ser compreendido a partir das leis de conservação de energia e de momento. Generalize o argumento para considerar processo nos quais os neutrons incidentes no cristal criam ou destroem dois fônons (espalhamento neutron+2 fônons).
 - (a) Enumere o número de caminhos distintos nos quais esse processo pode ocorrer.
 - (b) Discuta porque o processo de dois-fônons não produz picos estreitos na absorção de neutrons em função da energia incidente, para um ângulo de observação fixo, e por isso pode ser distinguido do processo de um-fônon.
6. (problema 5, cap. 13, Marder) Utilize a figura para estimar a temperatura de Debye do diamante e compare com o valor conhecido (2250 K).

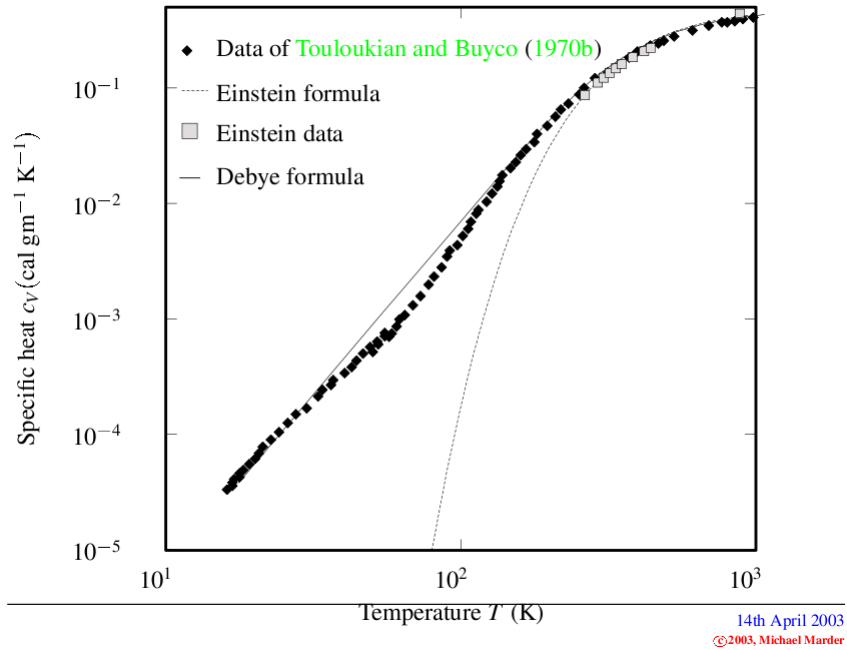


Figure 1: Calor específico para o diamante.

7. Considere uma cadeia linear monoatômica, com comprimento L , parâmetro de rede a , e apenas interações entre os primeiros vizinhos. Assuma que o potencial de interação tem a forma $U(x) = U_0 + \frac{1}{2}kx^2 + gx^3$ onde x é o deslocamento relativo em relação a posição de equilíbrio. Considere que uma força externa ΔF foi aplicada ao sistema, induzindo uma dilatação de L para L' no comprimento da cadeia. Calcule o parâmetro de Grüneisen para esse sistema. (Sugestão: aproxime o problema calculando o potencial aproximado para a cadeia linear após essa ter sido deslocada. Calcule as novas frequências para esse potencial - harmônico - aproximado.)
8. Calcule a energia interna e o calor específico de um conjunto de N osciladores clássicos em duas dimensões. Qual seria a dependência com a temperatura do calor específico de Debye em duas dimensões?
9. (problema 8, cap. 4, Ibach&Luth 3a. ed.) Considere a expansão para o espalhamento,

$$a \propto \sum_n e^{-i\vec{G} \cdot \vec{R}_n} \left[1 - i\vec{G} \cdot \vec{s}_n(t) \dots \right] e^{-i\omega_0 t}$$

e vá um passo além e calcule a média temporal da amplitude de espalhamento. Reescreva a expansão

$$1 - \frac{1}{2} \langle (\vec{G} \cdot \vec{s}_n)^2 \rangle_t$$

na forma (justifique)

$$\sim e^{-\frac{1}{2} \langle (\vec{G} \cdot \vec{s}_n)^2 \rangle_t}$$

Igualize a média temporal com a média estatística sobre um *ensemble* e calcule a intensidade de espalhamento para a rede primitiva.

No pre-fator $e^{-\langle (\vec{G} \cdot \vec{s}_n)^2 \rangle}$ a grandeza $w = \frac{1}{2} \langle (\vec{G} \cdot \vec{s}_n)^2 \rangle$ é conhecido como *fator de Debye-Waller*. Calcule o valor desse fator para (a) um oscilador clássico tridimensional e para (b) um oscilador quântico a $T=0$.

Seguindo nessa mesma linha, as contribuições adicionais serão responsáveis pelo efeito de *espalhamento difuso de raios X* (ver cap. 4, *Elements of Modern X-Ray Physics*, J. Als-Nielsen e Des McMorrow, John Wiley & Sons, 2001).