

F888 - Física do Estado Sólido

PROVA 2 - 2o. semestre 2009

1-Dinâmica de rede (2,5 pts). Considere uma rede monoatômica unidimensional com íons de massa M , separados por uma distância a . Considere a interação entre os íons sendo descrita por uma constante de mola K .

(a) Calcule a relação de dispersão de frequências.

(b) Considere agora que para um em cada dois íons, alternadamente, o íon original seja substituído por um isótopo com massa $M + \Delta M$, onde $\Delta M \ll M$. Despreze qualquer modificação na constante de mola entre os íons. Calcule a nova relação de dispersão de frequências.

(c) Faça um gráfico - em escala apropriada - de cada uma das relações de dispersões e compare. Discuta o que acontece quando $\Delta M \rightarrow 0$, i.e., a massa do isótopo é desprezível, comparando e descrevendo o que acontece com as relações de dispersão.

2-Gás de elétrons livres (2,5 pts.). Considere um sólido cuja dinâmica dos elétrons é descrita pelo modelo de gás de elétrons livres. Considere que o sistema está sujeito a um potencial extra que determina as seguintes condições de contorno: $\psi(x, y, z) = 0$, para $|x| > a$ onde a tem dimensões nanométricas.

(a) Calcule a densidade de estados do gás de elétrons nessas condições.

(b) Dê um exemplo (que não seja o do item (c)) onde essa condição possa existir, aproximadamente. Discuta em cada exemplo a origem do potencial confinador e a ordem de grandeza possível para a e também para o potencial confinador. Discuta as condições para as quais o potencial confinador possa ser considerado infinito.

(c) Considere o caso de um semiconductor tipo *GaAs*. A massa dos elétrons nesse sistema tem um valor efetivo igual a $m_e = 0,1m_0$, onde m_0 é a massa dos elétrons e $a = 100 \text{ \AA}$. Faça um esquema da densidade de estados com valores aproximados para a energia e para a densidade até energias iguais a 10^3 meV . Calcule a densidade de elétrons máxima para que o sistema ainda possa ser considerado bidimensional para perturbações infinitesimais a $T=0 \text{ K}$.

Para os cálculos numéricos considere:

$$\frac{\hbar^2}{m_0} = 2 \times 10^4 \text{ eV} - \text{\AA}^2$$

Não utilize calculadora. Apenas o primeiro algarismo significativo - ordem de grandeza - interessa. Esse número é fisicamente razoável. Por quê?

3-Propriedades térmicas (2,0 pts). Considere um cristal bidimensional com um único modo de dispersão de fônons dado pela relação

$$\omega^2 = \omega_0^2 (2 - \cos(q_x a) - \cos(q_y a))$$

- (a) Calcule a densidade de estados na aproximação de Debye, para q pequeno.
- (b) Calcule o calor específico para o sistema em baixas temperaturas, na aproximação de Debye.

Deixe os resultados de (a) e (b) indicados em função da temperatura de Debye.

4-Estrutura de banda (3,0 pts). Considere uma rede retangular bidimensional com constantes de rede a, b (direções x e y , respectivamente) e um potencial - periódico na rede cristalina - $V_{ef}(\vec{r})$.

- (a) Demonstre que $V_{ef}(\vec{r})$ pode ser escrito como uma expansão em série somente com vetores da rede recíproca \vec{G} .
- (b) Deduza a equação de Schroedinger para o espaço recíproco a partir da equação,

$$\mathcal{H}\psi(\vec{r}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_{ef}(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) = \varepsilon\psi(\vec{r})$$

- (c) Mostre que a função de onda pode ser escrita na forma $\psi(\vec{r}) = u(\vec{r})e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$, onde $u(\vec{r} + \vec{R}) = u(\vec{r})$, onde \vec{R} é um vetor qualquer da rede de Bravais.
- (d) Para $\vec{k}_1 = (\pi/a, \pi/b)$, $c_{\vec{k}_1}$ acoplará fortemente quais componentes $c_{\vec{k}_i}$ de $\psi(\vec{r})$? Identifique os valores de \vec{G} que devem ser incluídos na teoria de perturbação para encontrar os $c_{\vec{k}_i}$ em primeira ordem no potencial.