F-888 – Lista 1
(Ibach & Lüth, Cap. 5)

1) Mostre que o volume de uma cela unitária da rede recíproca é dado por $v_{recip}=(2\pi)^3/v$, onde v é o volume da cela unitária da rede cristalina, i.e., $v=\boldsymbol{a}_1\cdot(\boldsymbol{a}_2\times\boldsymbol{a}_3)$. Qual é o volume da primeira zona de Brillouin ?

2) Mostre que os deslocamentos atômicos associados a um modo de vibração com vetor de onda $\boldsymbol{q}+\boldsymbol{G}$, onde $\boldsymbol{G}$ é um vetor da rede recíproca, são idênticos à de um modo com vetor de onda **q**. Esse resultado implica que as soluções independentes para as equações de movimento podem ser buscadas restringindo que os vetores **q** pertençam apenas à primeira zona de Brillouin.

3) Mostre que as condições de contorno para as vibrações em um sólido com N celas unitárias (sendo com $N^{1/3}$ celas unitárias empilhadas em cada direção) leva a uma discretização dos valores de **q** permitidos para os modos vibracionais. Quantos vetores **q** dentro da primeira zona de Brillouin são consistentes com as condições de contorno periódicas ? Quais são eles ?

4) Com ajuda dos resultados acima mostre que a densidade de estados vibracionais é dada por $Z(\omega)=\frac{V}{(2\pi)^3}\int_{\omega=const}\frac{d^2\boldsymbol{f}_\omega}{|\nabla_{\boldsymbol{q}}\omega|}$, onde a integral de área é tomada sobre a superfície ω=const na primeira zona de Brillouin. Encontre uma relação analítica para *Z(ω)* para um meio elástico isotrópico com ω proporcional a q (aproximação de Debye).

5) A partir da distribuição de Boltzmann e da quantização de níveis de energia do oscilador harmônico com frequência natural ω, mostre que o valor médio para o número quântico n a uma temperatura T é dado por $\langle n\rangle_T=\frac{1}{e^{\hbar\omega/kT}-1}$.

6) A partir dos resultados acima, encontre uma relação analítica para o calor específico, em termos de uma integral definida, dentro da aproximação de Debye.

7) Encontre os limites $T\ll\Theta_D$ e $T\gg\Theta_D$ da relação encontrada no problema 6, e discuta os resultados. Compare com o resultado clássico.

8) Considere agora um modelo em que todos os osciladores têm uma mesma frequência ω_0 independente de q (modelo de Einstein). Calcule o calor específico para este problema e compare os limites $T\ll\Theta_D$ e $T\gg\Theta_D$ com os resultados do problema 7.

9) Estime a temperatura de Debye (em Kelvin) para o níquel com estrutura FCC e parâmetro de rede a=3.52 Å, utilizando as velocidades do som disponíveis no problema 4.5 do Ibach.

10) Kittel, Cap. 5, problema 1

11) Kittel, Cap. 5, problema 4