F-888 – Lista 4
(Ibach & Lüth, Cap. 9)

26) Mostre que, para um pacote de ondas planas, formado por uma combinação contínua de ondas planas $\psi_{\boldsymbol{k}} = A\, e^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r} - E(\boldsymbol{k})t/\hbar)}$ com um máximo estreito de amplitude centrado em $\mathbf{k_0}$, a velocidade de grupo, associada à velocidade da partícula descrita por este pacote de onda, é dada por $\boldsymbol{v_g} = \frac{1}{\hbar}\nabla_{\boldsymbol{k}} E(\boldsymbol{k_0})$. Considere agora um pacote de ondas de Bloch, formado por uma combinação de ondas de Bloch $\psi_{\boldsymbol{k}} = (\sum_{\boldsymbol{G}} C_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{G}}\, e^{i(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{G})\cdot\boldsymbol{r}}) e^{-i\,E(\boldsymbol{k})t/\hbar}$. Dê argumentos para justificar que o mesmo resultado para a velocidade de grupo obtido para um pacote de onda descrito no primeiro caso também é válido para um pacote de ondas de Bloch.

27) Utilizando o princípio da Correspondência para derivar equações de movimento para valores médios de observáveis quânticos, mostre que a dinâmica dos elétrons em bandas pode ser descrita em termos de uma relação análoga à 2a. Lei de Newton, introduzindo o conceito de uma massa efetiva $(m^*)_{ij}$. Encontre uma relação para $(1/m^*)_{ij}$ em termos da relação de dispersão de uma dada banda E(**k**).

28) Encontre a densidade de corrente elétrica associada a uma banda de energia, e mostre que ela é nula para bandas completamente preenchidas. Mostre que a corrente por uma banda quase totalmente preenchida é análoga à esperada por pseudo-partículas com carga e massa efetiva positivas (denominadas "buracos").

29) Discuta os diferentes mecanismos de espalhamento eletrônico (por defeitos, por fônons, e por outros elétrons), realçando aspectos associados às leis de conservação de momento linear e de energia.

30) Demonstre a equação de Boltzmann para a função de distribuição *f(**k**,**r**,t)* para o caso mais geral.

31) Utilizando o ansatz do tempo de relaxação para um material sujeito a um campo elétrico $\boldsymbol{\varepsilon}$ e com uma mesma temperatura *T* por toda a sua extensão (ou seja, homogêneo em **r**) e desprezando termos de ordem 2 ou superior em $\boldsymbol{\varepsilon}$, encontre *f(**k**)* e mostre que o resultado é equivalente a deslocarmos a superfície de Fermi no espaço **k** na mesma direção (mas em sentido oposto) do campo $\boldsymbol{\varepsilon}$. Ilustre esquematicamente o resultado no espaço **k**, e explique, utilizando este mesmo espaço, o aparecimento de uma corrente elétrica associada à aplicação de $\boldsymbol{\varepsilon}$.

32) Utilizando o modelo clássico para o movimento dos elétrons (modelo de Drude), encontre a condutividade e mobilidade de um metal em função da densidade de elétrons, massa do elétron e tempo de relaxação.

33) Ídem ao problema 32, utilizando o modelo microscópico para o movimento dos elétrons desenvolvido a partir da equação de Boltzmann. Compare com o resultado do Problema 32.

34) Discuta a dependência com a temperatura das contribuições à resistividade elétrica advindas dos mecanismos descritos no problema 29. Como identificar e separar cada contribuição em uma curva de $\rho(T)$ medida experimentalmente ?

35) Mostre que, para um metal sujeito à ação de um campo elétrico e gradiente de temperatura na

direção x em um material com estrutura cristalina com simetria cúbica, que $j_x = \sigma_{xx} \epsilon_x + L_{xx}^{12}(-\frac{\partial T}{\partial x})$ e que $j_{Qx} = L_{xx}^{21} \epsilon_x + \lambda_{xx}(-\frac{\partial T}{\partial x})$. Interprete fisicamente os parâmetros obtidos. Generalize estas relações para um formato vetorial/tensorial.

36) Discuta o princípio de funcionamento de um termopar (efeito Seebeck) e de um resfriador por efeito Peltier com base nas relações do problema 35.

37) Mostre que a razão entre a condutividade térmica e elétrica em metais é linearmente proporcional à temperatura e encontre a constante de proporcionalidade universal em termos de constantes fundamentais.