F-888A – Prova 2 – 22/10/2018

ATENÇÃO: TODAS AS RESPOSTAS DEVEM SER JUSTIFICADAS.

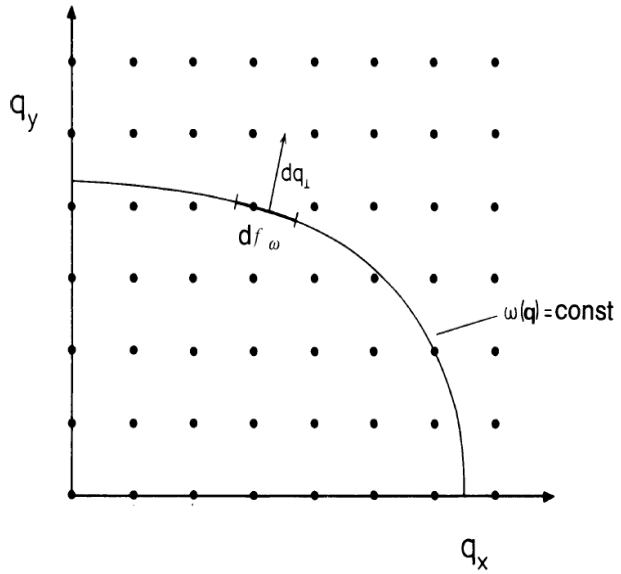
1) Calor Específico vibracional de um cristal bidimensional. Considere um cristal bidimensional, de modo que o movimento dos átomos se limite ao plano da camada.
(a) Impondo-se condições de contorno para o movimento dos átomos em uma área $A = L \times L$ contendo N celas unitárias em duas dimensões e r átomos por cela unitária, mostre que a densidade de estados vibracionais será dada por $Z(\omega) = \frac{A}{(2\pi)^2} \int_{\omega = const} \frac{d f_\omega}{|\nabla_q \omega|}$, onde a integral de linha é feita ao longo da curva no espaço **q** em que ω é constante. (1.0)
(b) Considere a aproximação de Debye com $\omega = c_T |\boldsymbol{q}|$ para o modo transversal e $\omega = c_L |\boldsymbol{q}|$ para o modo longitudinal. Resolva a integral em do ítem (a) dentro desta aproximação, chegando a uma relação analítica para $Z(\omega)$. (1.0)
(c) Encontre a frequência de Debye ω_D e temperatura de Debye $\Theta \equiv \hbar \omega_D / k$. (1.0)
(d) Utilizando o resultado em (b), e a energia média de cada oscilador $\epsilon(\omega, T) = \left(\frac{1}{e^{\hbar\omega/kT} - 1} + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$, encontre uma relação para o calor específico deste sólido bidimensional em termos de uma integral em ω. (1.0)
(e) Encontre o limite assintótico do calor específico para baixas temperaturas e mostre que ele é proporcional a T^2. Encontre a constante de proporcionalidade em termos das constantes definidas neste problema. (0.5)

2) Gás de elétrons livres bidimensional. Considere um gás de elétrons livres bidimensional, de modo que o movimento dos átomos se limite ao plano da camada.
(a) Impondo condições de contorno para a função de onda os elétrons livres em uma área $A = L \times L$ contendo N elétrons livres, encontre uma relação para a densidade de estados eletrônicos em energia, $D(E)$, considerando explicitamente a degenerescência de spin em cada nível. (1.5)
(b) Encontre a energia de Fermi a T=0 K. (1.0)

3) Na aproximação de tight binding, as bandas de energia derivadas de um nível atômico E_i podem ser descritas como $E_i(\boldsymbol{k}) \approx E_i - A - B \sum_{\boldsymbol{m}} e^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}_n - \boldsymbol{r}_m)}$, onde A e B são constantes relacionadas com a sobreposição de orbitais. Desmembre explicitamente a somatória chegando em uma relação de dispersão $E_i(k_x, k_y, k_z)$ em função de cossenos para:
(a) uma estrutura cúbica simples com parâmetro de rede a, (1.0)
(b) uma estrutura cúbica de corpo centrado com parâmetro de rede a, (1.0)
(c) uma estrutura cúbica de face centrada com parâmetro de rede a. (1.0)

GABARITO – PROVA 2

1) (a) As soluções das equações de movimento para as vibrações atômicas são do tipo ondas planas $u_{n\alpha i} \propto e^{i(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}_n - \omega t)}$. Desta forma, pode-se propor condições de contorno periódicas, que podem ser descritas como $u_{n\alpha i}(x+L, y) = u_{n\alpha i}(x, y+L) = u_{n\alpha i}(x, y)$ (condições de contorno fixas também podem ser impostas para a componenente real da solução, levando aos mesmos resultados finais). Desta forma, temos que $q_x = 2\pi n_x / L ; q_y = 2\pi n_y / L$, onde n_x e n_y são números inteiros. Considerando que $L = N_x a = N_y b$, onde a e b são os parâmetros de rede e N_x e N_y correspondem ao número de celas unitárias empilhadas em cada direção tal que $N = N_x \times N_y$, então $q_x = 2\pi n_x / N_x a ; q_y = 2\pi n_y / N_y b$. O número total de valores possíveis para vetores $\mathbf{q}=(q_x,q_y)$ na primeira zona de Brillouin será portanto $N_x \times N_y = N$, ou seja, o número de celas unitárias no cristal. Considerando que o volume da primeira zona de Brillouin inteira é $(2\pi)^2/(A/N)$, o número de estados disponíveis entre ω e ω+dω será portanto $dN \equiv Z(\omega)\, d\omega = \int_{\omega}^{\omega+d\omega} d^3\boldsymbol{q}/(4\pi^2/A) = \frac{A}{(2\pi)^2}\int\int_{\omega}^{\omega+d\omega} df_{\omega}\, dq_{perp} = \frac{A}{(2\pi)^2}\int\int_{\omega}^{\omega+d\omega} \frac{df_{\omega}\, d\omega}{|\nabla_{\boldsymbol{q}}\omega|}$.



Portanto: $Z(\omega) = \frac{A}{(2\pi)^2}\int_{\omega=const} \frac{df_{\omega}}{|\nabla_{\boldsymbol{q}}\omega|}$ (vide figura acima).

(b) Se $\omega = c|\boldsymbol{q}|$ (aprox. de Debye), a integração se dá sobre uma superfície circular em que $|\boldsymbol{q}| = const$ e $|\nabla_{\boldsymbol{q}}\omega| = c$, daí $Z(\omega) = \frac{A}{(2\pi)^2}\frac{2\pi q}{c} = \frac{A\omega}{2\pi c^2}$ para cada ramo. Para um cristal bidimensional, temos um ramo acústico longitudinal (correspondendo a movimentos atômicos na direção do vetor de onda **q**, e um ramo acústico transversal (movimentos perpendiculares a **q**) , e portanto a densidade total de estados vibracionais será $Z(\omega) = \frac{A}{2\pi}\left(\frac{1}{c_L^2} + \frac{1}{c_T^2}\right)\omega$.

(c) A temperatura de Debye ω_D é encontrada integrando a densidade de estados vibracionais até ω_D e igualando o resultado ao número total de osciladores em duas dimensões (= $2Nr$):

$$\int_0^{\omega_D} Z(\omega)\, d\omega = 2Nr \rightarrow \frac{A}{4\pi}\left(\frac{1}{c_L^2} + \frac{1}{c_T^2}\right)\omega_D^2 = 2Nr \rightarrow \omega_D = \sqrt{\frac{8\pi N r}{A\left(\frac{1}{c_L^2} + \frac{1}{c_T^2}\right)}}$$

. Portanto a temperatura de Debye será $\Theta = \hbar\omega_D / k = \frac{\hbar}{k}\sqrt{\frac{8\pi N r}{A\left(\frac{1}{c_L^2} + \frac{1}{c_T^2}\right)}}$

(d) A energia vibracional do sólido será dada por $U=\int_0^{\omega_D} Z(\omega)\epsilon(\omega,T)d\omega$, e portanto o calor específico será :

$$C_A=\frac{1}{A}\frac{dU}{dT}=\frac{1}{A}\int_0^{\omega_D} Z(\omega)\frac{\partial\epsilon(\omega,T)}{\partial T}d\omega=\frac{1}{2\pi}\left(\frac{1}{c_L^2}+\frac{1}{c_T^2}\right)\int_0^{\omega_D}\frac{(\hbar\omega^2/kT^2)e^{\hbar\omega/kT}}{(e^{\hbar\omega/kT}-1)^2}\hbar\omega\, d\omega \quad .$$

Substituindo a nova variável $y\equiv\hbar\omega/kT\rightarrow d\omega=(kT/\hbar)dy$, ficamos com

$$C_A=\frac{1}{2\pi}\left(\frac{1}{c_L^2}+\frac{1}{c_T^2}\right)\frac{k^3T^2}{\hbar^2}\int_0^{\Theta/T}\frac{y^3e^y}{(e^y-1)^2}dy=\frac{4NrK^3T^2}{A\hbar^2\omega_D^2}\int_0^{\Theta/T}\frac{y^3e^y}{(e^y-1)^2}dy=\frac{4kNr}{A}\left(\frac{T}{\Theta}\right)^2\int_0^{\Theta/T}\frac{y^3e^y}{(e^y-1)^2}dy$$

(e) Para baixas temperaturas, temos $\Theta/T\rightarrow\infty$, e portanto $C_A=\frac{4kNr}{A}\left(\frac{T}{\Theta}\right)^2\int_0^{\infty}\frac{y^3e^y}{(e^y-1)^2}dy$. Desta forma, o calor específico segue uma dependência $C_A\propto T^2$ no limite de baixas temperaturas.

2) (a) De forma análoga ao problema 1, propomos condições de contorno periódicas (condições de contorno fixas também levam ao mesmo resultado final), e assim também concluímos que teremos N valores possíveis de $\boldsymbol{k}=(k_x,k_y)$ na primeira zona de Brillouin. Assim, utilizando relação análoga à contida no enunciado do problema 1(a) e lá demonstrada, teremos, incluindo a degenerescência de spin:

$$Z(E)=\frac{A}{(2\pi)^2}\int_{Econst}\frac{df_E}{|\nabla_{\boldsymbol{k}}E|}(\times 2)=\frac{Am}{4\pi^2\hbar^2k}\int_{Econst}df_E(\times 2)=\frac{Am}{4\pi^2\hbar^2k}2\pi k(\times 2)=\frac{Am}{\pi\hbar^2}\quad ,$$

onde usamos que $E=\hbar^2k^2/2\mathrm{m}$ para um gás de elétrons livres. Assim, a densidade de estados em energia por unidade de área do material será dada por: $D(E)=\frac{m}{\pi\hbar^2}$, sendo portanto independente de *E* para um gás de elétrons em duas dimensões.

(b) A energia de Fermi pode ser encontrada pela relação $\int_0^{E_F}D(E)dE=N/A\rightarrow\frac{mE_F}{\pi\hbar^2}=N/A\rightarrow E_F=\frac{\pi\hbar^2N}{mA}$

3) (a) Para uma estrutura cúbica simples com parâmetro de rede *a*, um átomo em $\mathbf{r_n}$ está conectado com seus seis primeiros vizinhos em $\boldsymbol{r_m}=\boldsymbol{r_n}\pm(a,0,0);\boldsymbol{r_m}=\boldsymbol{r_n}\pm(0,a,0);\boldsymbol{r_m}=\boldsymbol{r_n}\pm(0,0,a)$. Desta forma:

$E_i(\boldsymbol{k})\approx E_i-A-B(\cos k_xa+\cos k_xa+\cos k_ya+\cos k_ya+\cos k_za+\cos k_za)$

$=E_i-A-2B(\cos k_xa+\cos k_ya+\cos k_za)$. Notar que a componente imaginária se cancela ao se somar contribuições com sinais opostos.

(b) Para uma estrutura cúbica de corpo centrado com parâmetro de rede *a,* um átomo em $\mathbf{r_n}$ está conectado com seus oito primeiros vizinhos em $\boldsymbol{r_m}=\boldsymbol{r_n}+(\pm a/2,\pm a/2,\pm a/2)$. Desta forma:

$E_i(\boldsymbol{k})\approx E_i-A-2B[\cos(k_x+k_y+k_z)a/2+\cos(k_x-k_y+k_z)a/2+\cos(k_x+k_y-k_z)a/2+\cos(k_x-k_y-k_z)a/2]$

$=E_i-A-8B[\cos(k_xa/2)\cos(k_ya/2)\cos(k_za/2)]$. Notar que várias contribuições se cancelam ao se somar termos com sinais opostos.

(c) Para uma estrutura cúbica de face centrada com parâmetro de rede *a,* um átomo em $\mathbf{r_n}$ está conectado com seus doze primeiros vizinhos em $\boldsymbol{r_m}=\boldsymbol{r_n}+(\pm a/2,\pm a/2,0);\boldsymbol{r_m}=\boldsymbol{r_n}+(\pm a/2,0,\pm a/2);\boldsymbol{r_m}=\boldsymbol{r_n}+(0,\pm a/2,\pm a/2)$. Desta forma:

$$E_i(\boldsymbol{k}) \approx E_i - A - 2B \times$$
$$[\cos(k_x+k_y)a/2+\cos(k_x-k_y)a/2+\cos(k_x+k_z)a/2+\cos(k_x-k_z)a/2+\cos(k_y+k_z)a/2+\cos(k_y-k_z)a/2]$$
$$= E_i - A - 4B[\cos(k_x a/2)\cos(k_y a/2)+\cos(k_x a/2)\cos(k_z a/2)+\cos(k_y a/2)\cos(k_z a/2)]$$

Notar que várias contribuições se cancelam ao se somar termos com sinais opostos.