F-888A – Prova 2 Substitutiva – 05/12/2018

ATENÇÃO: TODAS AS RESPOSTAS DEVEM SER JUSTIFICADAS.

1) a) Mostre que as condições de contorno periódicas 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 ? (1.0)

b) Considerando 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, mostre que a densidade de estados vibracionais para um sólido tridimensional 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 e V é o volume total do sólido. Encontre uma relação analítica para $Z(\omega)$ para um meio elástico isotrópico com ω proporcional a q (aproximação de Debye). (1.5)

2) a) Calcule a densidade de estados $D(E)$ para um gás de elétrons livres em uma agulha de tamanho L em uma dimensão (densidade de estados por unidade de comprimento). (1.0)
b) Na situação do ítem (a) para o caso 1D, suponha haver uma densidade n de elétrons por unidade de comprimento. Encontre a Energia de Fermi E_F em função de n. (1.5)

3) Considere uma estrutura cristalina quadrada com parâmetro de rede a e um único átomo por cela unitária (em duas dimensões).
a) Desenhe a primeira zona de Brillouin desta rede, e indique qual é a energia de um elétron livre com **k** localizado no vértice da primeira zona de Brillouin. (1.0)
b) Suponha que cada átomo contribua com um elétron para a banda de condução, que para cômputo de energia poderá ser considerado um elétron livre. Desenhe a "superfície" de Fermi deste material, localizando-a em relação à primeira zona de Brillouin. (1.5)