

## Ficha nº 8 de Estado Sólido

Artur Palha nº 46724

21 de Maio de 2003

### Exercício 28

O mínimo da primeira banda está no intervalo  $[0.37, 0.38]$ , o máximo encontra-se no intervalo  $[1.39, 1.40]$ .

O código utilizado para determinar estes valores foi o seguinte:

```
For[i=0,i<115,
{
  eig=0.35+i*0.01;
  B=NDSolve[{- (1/2)y''[x]-2Sin[x]^8 y[x]==eig
  y[x],y[0]==1,y'[0]==0},y,{x,0,40},MaxSteps->4000];
  Plot[{Evaluate[y[x]/. B],2 Sin[x]^8-3},{x,0,40},PlotRange->{-4,4},
  PlotStyle->{{RGBColor[0,0,1]},{RGBColor[1,0,0]}},PlotPoints->400];
};i++];
```

Não se apresentam as figuras porque são demasiadas.

Para se determinar os valores de  $k$  foi utilizado o código de *Mathematica* apresentado na figura 1

O gráfico de  $E(k)$  obtido é o seguinte:

### Exercício 29

Iniciaremos por calcular o valor máximo de  $q$  se  $\mathbf{K}$  estiver dentro da primeira zona de Brillouin.

Os vectores mais curtos da recíproca são:

$$\mathbf{G} = \frac{2\pi}{a}(\pm 1, \pm 1, \pm 1), \quad \mathbf{G} = \frac{2\pi}{a}(\pm 2, 0, 0)$$

e suas permutações.

Para estar num plano bisector, no primeiro caso temos que:

$$(1) \quad \frac{2\pi}{a}(q, 0, 0) \cdot (1, 1, 1) = \frac{1}{2}(1, 1, 1) \frac{2\pi}{a} \cdot (1, 1, 1) \frac{2\pi}{a}$$
$$(2) \quad \frac{2\pi}{a}(q, q, q) \cdot (1, 1, 1) = \frac{1}{2}(1, 1, 1) \frac{2\pi}{a} \cdot (1, 1, 1) \frac{2\pi}{a}$$

Ou seja:

$$(1) \quad q = \frac{3\pi}{a}, \quad (2) \quad q = \frac{\pi}{a}$$

```

For[i = 0, i < 115,
{
  b1 = 0;
  eig = 0.35 + i * 0.01;
  B = NDSolve[{-1/2 Y''[x] - 2 Sin[x]^8 Y[x] == eig Y[x], Y[0] == 1, Y'[0] == 0}, Y, {x, 0, 40}, MaxSteps -> 4000];
  (* Plot[{Evaluate[Y[x]/. B], 2 Sin[x]^8 - 3}, {x, 0, 40}, PlotRange -> {-4, 4},
  PlotStyle -> {{RGBColor[0, 0, 1]}, {RGBColor[1, 0, 0]}, {RGBColor[0, 0, 0]}}, PlotPoints -> 400]; *)
  (*Print[eig]; *)
  f[x_] := Evaluate[Y[x] /. B];
  h = N[40 / 10000];
  delf = N[1 / 40];
  A = Flatten[Table[f[h * (i)], {i, 0, 10000}]];
  intensidade = Abs[Fourier[A]]^2;
  lista = Table[{(delf) * j, intensidade[[j]]}, {j, 1, 10000}];
  (*ListPlot[lista, PlotRange -> All]; *)
  For[k = 2, k < 500,
  {
    If[lista[[k - 1]][[2]] > lista[[k]][[2]], 999,
    If[lista[[k + 1]][[2]] < lista[[k]][[2]],
    If[b1 < lista[[k]][[2]],
    {
      b1 = lista[[k]][[2]];
      B5 = Append[B5, {eig, lista[[k]][[1]]}];
      (*Print[{eig, lista[[k]][[1]]}]; *)
    }, 222], 111]
  }
  ]; k++;
]; i++;

```

Figura 1: Código em Mathematica para determinar os vectores de onda k

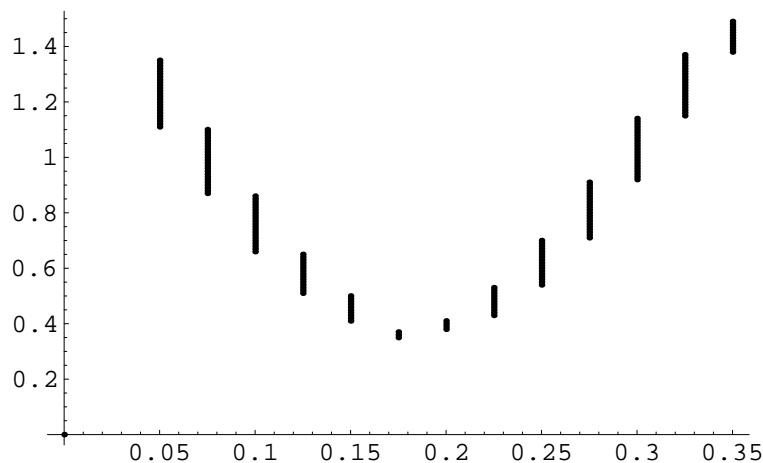


Figura 2: Gráfico de E(k)

No segundo caso temos que:

$$(1) \quad \frac{2\pi}{a}(q, 0, 0) \cdot (2, 0, 0) = \frac{1}{2} \cdot (2, 0, 0) \frac{2\pi}{a} \cdot (2, 0, 0) \frac{2\pi}{a}$$

$$(2) \quad \frac{2\pi}{a}(q, q, q) \cdot (2, 0, 0) = \frac{1}{2} \cdot (2, 0, 0) \frac{2\pi}{a} \cdot (2, 0, 0) \frac{2\pi}{a}$$

Ou seja:

$$(1) \quad q = \frac{2\pi}{a}, \quad (2) \quad q = \frac{2\pi}{a}$$

O valor inferior, para os dois casos é:

$$(1) \quad q = \frac{2\pi}{a}, \quad (2) \quad q = \frac{\pi}{a}$$

correspondente ao limite da zona de Brillouin.

Definindo:

$$(1) \quad q = s\frac{2\pi}{a}, \quad (2) \quad q = s\frac{\pi}{a}$$

temos que, para os electrões livres:

$$(1) \quad E = \frac{\hbar^2 K^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2\pi}{a}\right)^2 s^2$$

$$(2) \quad E = \frac{\hbar^2 K^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{a}\right)^2 s^2$$

O que dá  $E \propto s^2$ .

Por cada vector  $\mathbf{G}$  vamos ter uma banda. Para um vector  $\mathbf{K}_{\text{cristal}} = (s, 0, 0)\frac{2\pi}{a}$  e  $\mathbf{K}_{\text{cristal}} = (s, 0, 0)\frac{2\pi}{a}$  vamos calcular os vectores  $\mathbf{K}_{\text{livre}} = \mathbf{K}_{\text{cristal}} + \mathbf{G}$  correspondentes.

(1)

$$\begin{aligned} \mathbf{G} &= (0, 0, 0), & \mathbf{K}_{\text{livre}} &= (s, 0, 0)\frac{2\pi}{a}, & E &\propto s^2 \\ \mathbf{G} &= (-2, 0, 0)\frac{2\pi}{a}, & \mathbf{K}_{\text{livre}} &= (s-2, 0, 0)\frac{2\pi}{a}, & E &\propto (s-2)^2 \\ \mathbf{G} &= (2, 0, 0)\frac{2\pi}{a}, & \mathbf{K}_{\text{livre}} &= (s+2, 0, 0)\frac{2\pi}{a}, & E &\propto (s+2)^2 \\ \mathbf{G} &= (-1, \pm 1, \pm 1)\frac{2\pi}{a}, & \mathbf{K}_{\text{livre}} &= (s-1, \pm 1, \pm 1)\frac{2\pi}{a}, & E &\propto (s-1)^2 + 2 \\ \mathbf{G} &= (1, \pm 1, \pm 1)\frac{2\pi}{a}, & \mathbf{K}_{\text{livre}} &= (s+1, \pm 1, \pm 1)\frac{2\pi}{a}, & E &\propto (s+1)^2 + 2 \\ \mathbf{G} &= (0, \pm 2, \pm 0)\frac{2\pi}{a}, & \mathbf{K}_{\text{livre}} &= (s, \pm 2, 0)\frac{2\pi}{a}, & E &\propto s^2 + 4 \end{aligned}$$

(2)

$$\begin{aligned} \mathbf{G} &= (0, 0, 0), & \mathbf{K}_{\text{livre}} &= (s, s, s)\frac{2\pi}{a}, & E &\propto 3s^2 \\ \mathbf{G} &= (-2, 0, 0)\frac{2\pi}{a}, & \mathbf{K}_{\text{livre}} &= (s-2, s, s)\frac{2\pi}{a}, & E &\propto (s-2)^2 + 2s^2 \\ \mathbf{G} &= (2, 0, 0)\frac{2\pi}{a}, & \mathbf{K}_{\text{livre}} &= (s+2, s, s)\frac{2\pi}{a}, & E &\propto (s+2)^2 + 2s^2 \\ \mathbf{G} &= (-1, \pm 1, \pm 1)\frac{2\pi}{a}, & \mathbf{K}_{\text{livre}} &= (s\pm 1, s\pm 1, s\pm 1)\frac{2\pi}{a}, & E &\propto 3(s\pm 1)^2, 2(s\pm 1)^2 + (s\mp 1)^2 \end{aligned}$$

As funções  $E(s)$  foram traçados, resultando nos gráficos apresentados na figura 3.

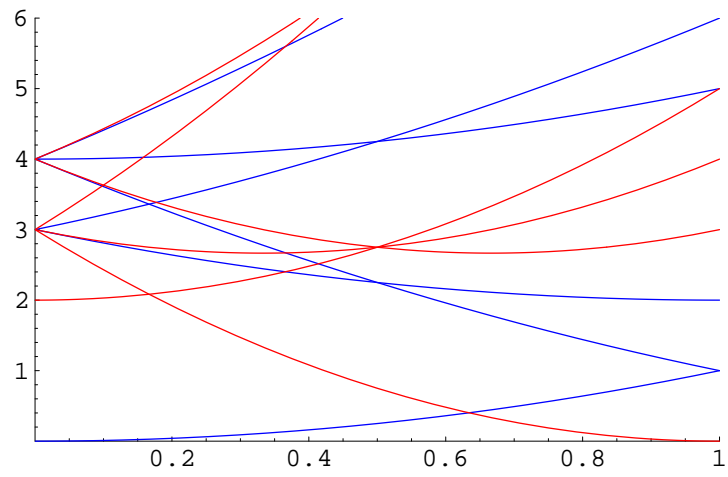


Figura 3: Gráfico das bandas de energia. (1) a azul, (2) a vermelho.