

Ficha nº 7 de Estado Sólido

Artur Palha nº 46724

15 de Maio de 2003

Exercício 19

a)

A velocidade do som é dada por:

$$v_{\text{som}} = \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k \rightarrow 0}$$

Assim, as velocidades transversal e longitudinal são dadas pelos declives das tangentes na origem.

Obtém-se então os seguintes resultados:

$$\begin{aligned} \text{Longitudinal} &\longrightarrow \frac{\Delta f}{\Delta(q/q_{\text{max}})} \simeq 9 \text{ THz} \\ \text{Transversal} &\longrightarrow \frac{\Delta f}{\Delta(q/q_{\text{max}})} \simeq 5 \text{ THz} \end{aligned}$$

Atendendo a que:

$$q_{\text{max}} = \sqrt{3} \frac{\pi}{a}$$

obtém-se os seguintes resultados para as velocidades:

$$\begin{aligned} \text{Longitudinal} &\longrightarrow v_L \simeq 5.9 \times 10^3 \text{ m s}^{-1} \\ \text{Transversal} &\longrightarrow v_T \simeq 3.3 \times 10^3 \text{ m s}^{-1} \end{aligned}$$

b)

Uma vez que existem três ramos ópticos e três acústicos (dois transversais para cada um dos modos), visto que existem $3p$ ramos quando existem p átomos por célula primitiva logo têm de existir 2 átomos por célula primitiva.

c)

O modelo simples mais apropriado é aproximar os modos ópticos por um modelo de Einstein e os modos acústicos por um modelo de Debye.

Serão apresentados os modelos de Debye e de Einstein.

Debye

Neste modelo a velocidade do som é considerada constante para cada tipo de polarização. A relação de dispersão é escrita como:

$$\omega = vk$$

A densidade de estados é, como se sabe:

$$\begin{aligned} D(\omega) &= \frac{dN}{d\omega} \\ &= \frac{VK^2}{2\pi^2} \frac{dK}{d\omega} \\ &= \frac{V\omega^2}{2\pi^2v^3} \end{aligned}$$

se existirem N células primitivas na amostra, o número total de modos acústicos de fonões é N . Uma frequência de *cutoff* (ω_D) é definida como sendo:

$$N = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \frac{4\pi K^3}{3}$$

O que dá origem a :

$$\omega_D^3 = 6\pi^2 \frac{v^3 N}{V}$$

No modelo de Debye não são permitidos modos do vector de onda superiores a K_D :

$$K_D = \frac{\omega_D}{v} = \left(\frac{6\pi^2 N}{V}\right)^{\frac{1}{3}}$$

A energia térmica é dada por:

$$\begin{aligned} U &= \int d\omega D(\omega) \langle n(\omega) \rangle \hbar\omega \\ &= \int_0^{\omega_D} d\omega \left(\frac{V\omega^2}{2\pi^2v^3}\right) \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{\tau}} - 1} \end{aligned}$$

para cada tipo de polarização.

Assume-se que a velocidade dos fonões é independente da polarização, pelo que se multiplica pelo factor 3:

$$\begin{aligned} U &= \frac{3V\hbar}{2\pi^2v^3} \int_0^{\omega_D} d\omega \frac{\omega^3}{e^{\frac{\hbar\omega}{\tau}} - 1} \\ &= \frac{3Vk_B^4 T^4}{2\pi^2v^3\hbar^3} \int_0^{x_D} dx \frac{x^3}{e^x - 1} \end{aligned}$$

onde:

$$x \equiv \frac{\hbar\omega}{\tau} \equiv \frac{\hbar\omega}{k_B T}$$

consequentemente:

$$x_D \equiv \frac{\hbar\omega_D}{\tau} \equiv \frac{\theta}{T}$$

O que define a temperatura de Debye θ em termos de ω_D :

$$\theta = \frac{\hbar v}{k_B} \left(\frac{6\pi^2 N}{V}\right)^{\frac{1}{3}}$$

Pelo que a energia total dos fonões é:

$$U = 9Nk_B T \left(\frac{T}{\theta}\right)^3 \int_0^{x_D} dx \frac{x^3}{e^x - 1}$$

Logo a capacidade calorífica, sendo $C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V$ fica:

$$C_V = \frac{3V\hbar^2}{2\pi^2 v^3 k_B T^2} \int_0^{\omega_D} d\omega \frac{\omega^4 e^{\frac{\hbar\omega}{\tau}}}{\left(e^{\frac{\hbar\omega}{\tau}} - 1\right)^2}$$

O que não é mais que:

$$C_V = 9Nk_B \left(\frac{T}{\theta}\right)^3 \int_0^{x_D} dx \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2}$$

De notar que para $T \gg \theta$ a capacidade calorífica tende para o valor clássico de $3NK_B$.

Einstein

Neste modelo consideram-se N osciladores com a mesma frequência ω_0 e a uma dimensão. A densidade de estados de Einstein é:

$$D(\omega) = N\delta(\omega - \omega_0)$$

A energia térmica do sistema é:

$$U = N \langle n \rangle \hbar\omega = \frac{N\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{\tau}} - 1}$$

onde se escreveu ω ao invés de ω_0 para simplificar a notação. Assim, C_V fica:

$$C_V = Nk_B \left(\frac{\hbar\omega}{\tau}\right)^2 \frac{e^{\frac{\hbar\omega}{\tau}}}{\left(e^{\frac{\hbar\omega}{\tau}} - 1\right)^2}$$

A três dimensões surge apenas um factor 3:

$$C_V = 3Nk_B \left(\frac{\hbar\omega}{\tau}\right)^2 \frac{e^{\frac{\hbar\omega}{\tau}}}{\left(e^{\frac{\hbar\omega}{\tau}} - 1\right)^2}$$

O que fica:

$$C_V = 3Nk_B \left(\frac{\hbar\omega_E}{\tau}\right)^2 \frac{e^{\frac{\hbar\omega}{\tau}}}{\left(e^{\frac{\hbar\omega}{\tau}} - 1\right)^2}$$

onde ω_E é a frequência de Einstein.

C_V

Para os modos ópticos usa-se frequências angulares aproximadas de $2\pi \times 8.6$ THz e $2\pi \times 8.2$ THz. Para os modos acústicos usa-se as velocidades do som calculadas anteriormente.

q_D é dado por:

$$q_D = \sqrt{\frac{6\pi^2}{V_{\text{celula}}}} \\ \simeq 1.09 \times 10^{10} \text{ m}$$

Para o modelo de Einstein (modo óptico) teremos:

$$T_{EL} = \frac{\hbar\omega_{EL}}{k_B} \simeq \frac{1.05 \times 10^{-34} \times 2\pi \times 8.2 \times 10^{12}}{1.38 \times 10^{-23}} \simeq 395 \text{ °k}$$

$$T_{ET} = \frac{\hbar\omega_{ET}}{k_B} \simeq \frac{1.05 \times 10^{-34} \times 2\pi \times 8.6 \times 10^{12}}{1.38 \times 10^{-23}} \simeq 413 \text{ °k}$$

Para o modelo de Debye (modo acústico) teremos:

$$\theta_{DL} = \frac{\hbar q_D v_L}{k_b} \simeq \frac{1.05 \times 10^{-34} \times 1.09 \times 10^{10} \times 5.9 \times 10^3}{1.38 \times 10^{-23}} \simeq 490 \text{ °k}$$

$$\theta_{DT} = \frac{\hbar q_D v_T}{k_b} \simeq \frac{1.05 \times 10^{-34} \times 1.09 \times 10^{10} \times 3.3 \times 10^3}{1.38 \times 10^{-23}} \simeq 275 \text{ °k}$$

Na figura 1 são apresentados os gráficos dos C_v , total e para os diversos modos.

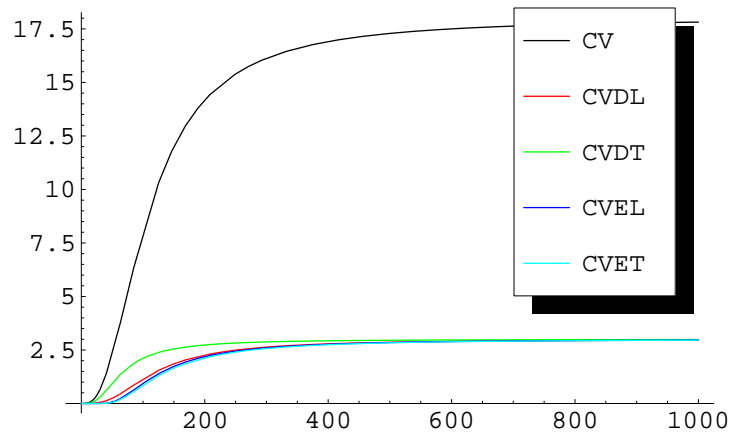


Figura 1: C_v total e para os diversos modos.

Exercício 20

Em anexo

Exercício 21

a)

A solução da equação de Schrödinger para partículas livres, a duas dimensões, é:

$$\psi(x, y) = Ae^{i\vec{K}\cdot\vec{x}} + Be^{-i\vec{K}\cdot\vec{x}}$$

As condições de fronteira de barreira infinita, $\psi(0, y) = 0$ e $\psi(x, 0) = 0$, simplificam esta solução a:

$$\psi(x, y) = C \sin(\vec{K} \cdot \vec{x})$$

O que, fazendo a expansão trigonométrica não é mais que:

$$\psi(x, y) = C [\cos(K_x x) \sin(K_y y) + \sin(K_x x) \cos(K_y y)]$$

Novamente, agora aplicando as condições fronteira $\psi(L_x, y) = 0$ e $\psi(x, L_y) = 0$ obtém-se:

$$\begin{aligned} K_x &= \frac{n\pi}{L_x} \Rightarrow p_x = \frac{n\pi\hbar}{L_x} \\ K_y &= \frac{m\pi}{L_y} \Rightarrow p_y = \frac{m\pi\hbar}{L_y} \end{aligned}$$

Combinando estas duas equações obtém-se que a energia do sistema é:

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{n^2}{L_x^2} + \frac{m^2}{L_y^2} \right)$$

Como o vector de onda de Fermi é o vector de onda correspondente à partícula com a energia maior à temperatura de $0^\circ K$ e como existem N partículas, teremos:

$$\begin{aligned} K_F &= \frac{N\pi}{L_x L_y} \sqrt{L_x^2 + L_y^2} \\ E_F &= \frac{N^2 \pi^2 \hbar^2}{2m L_x^2 L_y^2} (L_x^2 + L_y^2) \end{aligned} \quad (1)$$

b)

Da equação 1 obtém-se que:

$$N = \frac{L_x L_y}{\pi \hbar \sqrt{L_x^2 + L_y^2}} \sqrt{2mE}$$

Notando ainda que a densidade de estados é:

$$D(E) = \frac{dN}{dE} \quad (2)$$

$$= \frac{1}{2} \frac{\sqrt{2m}}{\hbar\pi} \frac{L_x L_y}{\sqrt{L_x^2 + L_y^2}} \frac{1}{\sqrt{E}} \quad (3)$$

A energia do sistema (U) em função da temperatura (T) é dada por:

$$U = \int_0^\infty d\epsilon \epsilon D(\epsilon) f(\epsilon)$$

Onde

$$f(\epsilon) = \frac{1}{e^{\frac{\epsilon - \mu}{k_B T}} + 1}$$

é a distribuição de Fermi-Dirac.

O potencial químico é dado pela equação:

$$N = \int_0^\infty d\epsilon D(\epsilon) f(\epsilon)$$

Resolvendo este sistema de equações tem-se o problema resolvido, o que é complicado.