

Ficha nº 8 de Estado Sólido

Artur Palha nº 46724

21 de Maio de 2003

Exercício 22

a)

Da solução da equação de Schrödinger para condições fronteira periódicas, verifica-se que:

$$K_x = \frac{2n_x\pi}{L}, \quad K_y = \frac{2n_y\pi}{L}, \quad K_z = \frac{2n_z\pi}{L}$$

Como, ao contrário do que foi, erradamente, feito na ficha anterior o vector de onda de Fermi é calculado da seguinte forma.

O volume mínimo ocupado, no espaço K é $\frac{\pi^3}{L^3}$.

Tal significa que existem, num volume esférico de raio K_F

$$\frac{\frac{4}{3}\pi K_F^3}{\frac{1}{2}\frac{8\pi^3}{L^3}} = N$$

onde N é o número de partículas e o factor $\frac{1}{2}$ foi colocado para entrar em consideração com a degenerescência no *spin* do electrões.

Logo:

$$\begin{aligned} K_F &= \left(\frac{3\pi^2 N}{L^3} \right)^{\frac{1}{3}} \\ &= (3\pi^2 n)^{\frac{1}{3}} \end{aligned}$$

onde $n = \frac{N}{L^3}$ é a densidade de electrões.

Como a rede é fcc isso significa que existem:

$$\frac{1}{2} \cdot 6 + \frac{1}{8} \cdot 8 = 4$$

átomos por célula. O que dá, já que existem 3 electrões de valência por átomo: 12 electrões por célula. Como cada célula tem um volume:

$$V = a^3 \simeq 6.64 \times 10^{-29} \text{ m}^3$$

teremos uma densidade $n = \frac{12}{a^3} \simeq 7.97 \times 10^{-29} \text{ electron.m}^{-3}$. O que dá um vector de onda de Fermi:

$$K_F = \left(3\pi^2 \frac{12}{a^3} \right)^{\frac{1}{3}} \simeq 1.75 \times 10^{10} \text{ m} \quad (1)$$

b)

A energia de Fermi (ϵ_F) é dada por:

$$\epsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} K_F^2 \simeq 11.65 \text{ eV} \quad (2)$$

c)

A equação:

$$\epsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} K_F^2 = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{3\pi^2 N}{L^3} \right)^{\frac{2}{3}}$$

pode ser invertida e exprimir o número de estado ocupados $N(\epsilon)$ em função da energia ϵ :

$$N(\epsilon) = \frac{V}{3\pi^2} \left(\frac{2m\epsilon}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}}$$

O que implica que a densidade de estados, $N(\epsilon + d\epsilon) - N(\epsilon) = D(\epsilon)d\epsilon$ é:

$$D(\epsilon) = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \epsilon^{\frac{1}{2}}$$

Para ser em estados por eV, basta dividir pela carga do electrão:

$$D(\epsilon) = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{\epsilon^{\frac{1}{2}}}{1.602 \times 10^{-19}} \quad (\text{eV})$$

Exercício 23

A energia cinética de um gás tridimensional de N electrões livres, a 0°K é dada por:

$$U_0 = \frac{3}{5} N \epsilon_F$$

Das equações 1 e 2 verifica-se que:

$$P = \frac{2}{3} \frac{U_0}{V}$$

A definição de compressibilidade (β) é:

$$\beta = \frac{1}{B}$$

onde $B = -V \frac{\partial P}{\partial V}$ é o *bulk modulus*. Logo a compressibilidade de um gas de fermiões a 0°K é:

$$\beta = \frac{3}{5P}$$