FÍSICA DA MATÉRIA CONDENSADA

Problemas - 3ª Série

1. Considere uma cadeia monoatómica unidimensional de parâmetro a com interacções entre primeiros vizinhos. Supondo que a interacção dominante para desvios das posições de equilibrio se pode escrever:

$$U(\Delta r) = \frac{1}{2}C(\Delta r)^2$$

   (a) Calcule o espectro completo das vibrações do sistema e represente-o graficamente.

   (b) Calcule a velocidade de propagação dos modos em função de k.

   (c) Mostre que as frequências que se podem propagar na rede são limitadas superiormente por ω_{max}.

   (d) O que acontece a vibrações excitadas na superficie do material com $\omega > \omega_{max}$? Mostre que estas excitações afectam a rede num certo comprimento l que é função do valor da frequência. Calcule a relação $l = l(\omega)$ e represente-a graficamente.

2. Considere uma rede monoatómica unidimensional de parâmetro a com interacções entre n vizinhos.

   (a) Determine o espectro de vibrações possiveis nesta rede. Esquematize graficamente $\omega(k)$.

   (b) Calcule a velocidade de propagação dos modos normais e represente-a em função de k.

   (c) Compare com os resultados para a rede unidimensional com interacções apenas entre primeiros vizinhos.

3. A relação de dispersão de fonões para uma cadeia linear diatómica (massas M_1 e M_2 e distância a) é dada por:

$$\omega^2 = C(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2}) \pm C\left(\left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2}\right)^2 - \frac{4\sin^2(ka/2)}{M_1 M_2}\right)^{\frac{1}{2}} \quad (1)$$

   onde, $M_1 > M_2$, ω é a frequência angular, k é o vector de onda e C a constante de força (entre primeiros vizinhos).

   (a) Esboce um gráfico da relação de dispersão e da densidade de modos normais para todas as frequências possíveis.

   (b) Justifique a forma das curvas fisicamente e escreva as formas limites de $\omega(k)$ e $D(\omega)$, perto de $k = 0$ e $k = \pm\pi/a$.

   (c) Qual é a banda de frequências restrita a modos de bordo ('edge modes', o equivalente em 1d a modos de superfície)?

(d) Qual é a forma geral da solução das equações de movimento para os modos de bordo, considerados na alnea anterior ?

4. Considere um modelo de fonões para as vibrações atómicas.

   (a) O que são fonões independentes ?

   (b) Discuta a necessidade de ir para além de um modelo de fonões independentes, para compreender a expansão térmica de isolantes.

   (c) Mostre (somando as energias cinética e potencial) que a média temporal da energia total por átomo, num modo acústico (numa aproximação unidimensional) é $\frac{1}{2}M\omega^2 u_0^2$, para uma onda plana, $u = u_0 \cos(\omega t - kna)$, onde os símbolos têm o significado usual.

   (d) Um feixe de ultrasons, de frequência $100MHz$, é propagado num cristal de alumínio de volume $1cm^3$. (Suponha que a propagação é na direcção [100] e que o Al é cúbico simples.) Quantos fonões são excitados neste modo, se a amplitude média (root mean square) das vibrações longitudinais for $1\mathring{A}$? A densidade do Al é $2.7gcm^{-3}$ e o seu peso atómico 27.

5. Considere uma rede cristalina a uma temperatura finita T, tal que a amplitude de vibração dos átomos em torno da respectiva posição de equilibrio é pequena.

   (a) Escreva uma expressão geral para a energia potencial em termos dos deslocamentos $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ em relação à posição de equilibrio $\mathbf{r_0}$, no quadro da aproximação harmónica e o hamiltoneano respectivo.

   (b) Por analogia com o caso do oscilador harmónico quântico escreva o hamiltoneano para este sistema usando coordenadas normais e mostre que o sistema pode ser considerado como um gás de fonões. Explique porque é que na aproximação harmónica os fonões podem ser considerados independentes.

   (c) Mostre que a introdução de um termo de terceira ordem em $\mathbf{u}$ para a energia potencial, implica uma interacção entre fonões.

6. (a) Mostre que os fonões não correspondem a um transporte de momento pela rede senão no caso $\mathbf{k} = 0$. O que significa então associar-lhes um momento cristalino $\hbar\mathbf{k}$?

   (b) No caso de uma experiência de difracção de raios X tanto o fotão incidente como o fotão emergente têm momento linear. Explique a conservação de momento durante o processo de difracção.

7. Mostre que o número de fonões num modo de energia $\hbar\omega$ se relaciona com a amplitude de vibração dos átomos para essa frequência por

$$u_0^2 = 2(n + \frac{1}{2})\hbar/(\rho V \omega) \tag{2}$$

   onde os simbolos têm os significados usuais.

8. (a) Calcule o número médio de fonões com energia $\hbar\omega$ num cristal à temperatura T.

(b) Calcule os limites de altas e baixas temperaturas e discuta a validade da aproximação harmónica na gama de temperaturas considerada.

9. (a) Descreva o modelo de Einstein para o calor especifico dos sólidos.

   (b) Calcule o calor especifico deste modelo nos limites das altas e baixas temperaturas.

   (c) Discuta a validade do modelo.

10. Considere uma rede quadrada bidimensional com interacções entre primeiros vizinhos.

    (a) Calcule o calor especifico no modelo de Debye para a rede considerada. Represente graficamente, de forma aproximada, a variação do calor especifico calculada.

    (b) Calcule a densidade de estados segundo a direcção $< 10 >$ para a mesma rede, considerando os estados contidos na primeira zona de Brioullin. Compare com a densidade de estados calculada no modelo de Debye.

11. (a) Mostre que o modelo harmónico utilizado no estudo das vibrações de um cristal não é compativel com a expansão térmica.

    (b) Mostre que a partir da introdução de termos anharmónicos no hamiltoneano considerado na alinea anterior é possivel obter expansão térmica. Explique os diferentes termos introduzidos em termos de interacções entre fonões.