

FÍSICA DA MATÉRIA CONDENSADA I

1ª chamada

31 de Janeiro de 1997

1. (a) Explique em que consiste a difracção de Bragg e deduza a expressão do factor de estrutura.

- (b) Mantendo fixas as orientações do cristal, do feixe incidente e a posição do detector e variando o c.d.o. dos neutrões incidentes, obtiveram-se os seguintes resultados:

reflexão n ^o :	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
c.d.o. $\lambda/\text{Å}$:	3.58	1.79	1.19	0.89	0.72	0.60	0.51	0.45	0.40	0.36
S^2 corrigido:	5.3	5.4	21.4	5.4	5.2	21.7	5.5	5.1	22.0	5.0

O ângulo entre o feixe incidente e o detector é de 60° . Retire dos dados experimentais a informação que puder acerca da estrutura do monocristal.

2. Suponha que a constante de força num metal unidimensional, é dada por

$$C_p = A \frac{\sin pk_0 a}{pa} \quad (1)$$

onde A , k_0 são constantes, a é o parâmetro da rede e p é o índice atómico (i.e., C_1 é a força entre primeiros vizinhos, C_2 entre segundos vizinhos, etc.). Use esta relação para derivar expressões para ω^2 e $\frac{\partial \omega^2}{\partial k}$. Mostre que a derivada diverge, quando $k = k_0$.

3. O alumínio tem uma estrutura cúbica de faces centrada com aresta $a = 4.05\text{Å}$ e valência 3. O nível de Fermi está $12eV$ acima do mínimo da primeira banda de electrões quase-livres. Suponha que o modelo de electrões livres, com uma massa efectiva, é válido e calcule:

- (a) o raio da esfera de Fermi
(b) a massa efectiva dos electrões no alumínio
(c) a razão entre o volume da esfera de Fermi e da primeira zona de Brioullin. Comente o seu resultado.

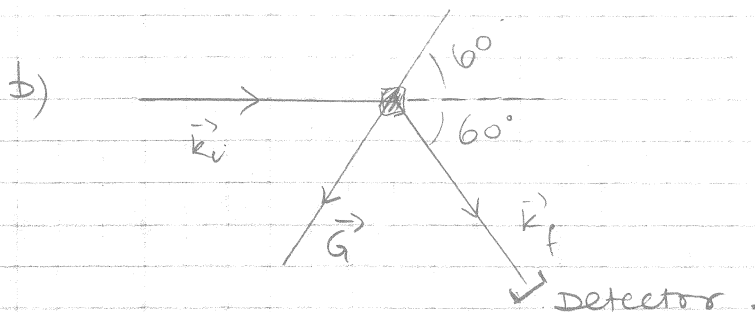
4. Mostre que dentro do modelo de electrões livres de um metal, a densidade de estados para a energia de Fermi, pode ser escrita como $D(E_F) = 3N/2E_F$. Use este resultado para mostrar que o calor específico é dado por, $C_{el} = \frac{1}{2}\pi^2 Nk_B(T/T_F)$, onde os símbolos têm o significado usual. O Cu tem um electrão livre por átomo, o seu peso atómico é 63 e a sua densidade é $8.8gcm^{-3}$. Calcule a energia de Fermi e dessa forma estime a razão entre o calor específico electrónico do Cu e o calor específico da rede, à temperatura de fusão, $1300K$. Discuta qualitativamente o que acontece a esta razão, a temperaturas muito abaixo de Θ_D . ($\Theta_D = 300K$ para o Cu.)

5. Impurezas dadoras são adicionadas a um cristal de silício, na razão de um átomo de impureza por 10^{10} átomos de silício ($\rho_{Si} = 2.42 \times 10^3 \text{Kg}m^{-3}$ e $A_{Si} = 28$). Determine a condutividade do silício dopado, supondo que a mobilidade dos electrões é $\mu_n = 0.13m^2/V$ e que a densidade dos dadores é muito superior à densidade intrínseca dos electrões e das lacunas.

1ª chamada

1. a) Ver Christmann

$$S(\vec{G}) = \sum_m f_m e^{-i\Delta\vec{s} \cdot \vec{P}_m} = \sum_m f_m e^{-i\vec{G} \cdot \vec{P}_m}$$



De, $\vec{G} = \vec{k}_f - \vec{k}_i$ e $|\vec{k}_i| = |\vec{k}_f| = \frac{2\pi}{\lambda}$ com $\cos(\vec{k}_f, \vec{k}_i) =$

vem

$$G^2 = 2\left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2 - \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2$$

ie,

$$G = \frac{2\pi}{\lambda}$$

Por outro lado,

$$d_{hkl} = \frac{2\pi}{|\vec{G}_{hkl}|}$$

e então $d_{hkl} = \lambda$.

Isto poderia t.b. obter-se + fácil/ de lei de Bragg

$$2d \sin\theta = n\lambda$$

$$\theta = 30^\circ \quad \sin\theta = \frac{1}{2} \quad \text{e} \quad d = n\lambda$$

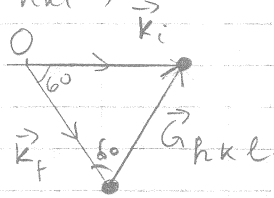
$$n=1 \Rightarrow d_{hkl} = \lambda$$

A distância entre os planos \bar{g} refletem os números e $3,58 \text{ \AA}$.

Estrutura do cristal?

2

Não é uma rede sem motivo, pois se fosse não haveria uma modulação periódica de S^2 , com múltiplos de 3 do módulo do \vec{G}_{hkl} , mais pequenos.



onde $\vec{G} = h\vec{A} + k\vec{B} + l\vec{C}$ onde \vec{A} , \vec{B} e \vec{C} são os vetores da rede recíproca.

Relação entre hkl fixa, mas impossível de determinar sem mais informação.

Vamos supor o caso mais simples:

2 átomos idênticos em $(0, 0, 0)$ e (u, v, w) referidos aos eixos (primitivos) \vec{a} , \vec{b} e \vec{c} da rede real.

$$S = f \left(1 + e^{i2\pi(hu + kv + lw)} \right)$$

Consideremos as 3 primeiras reflexões

$$\vec{G}_3 = 3\vec{G}_1 \quad \text{e} \quad \vec{G}_2 = 2\vec{G}_1 \quad \text{com} \quad \vec{G}_1 = h\vec{A} + k\vec{B} + l\vec{C}$$

$$S_1 = f(1 + e^{i2\pi\alpha}) \quad \alpha = hu + kv + lw$$

$$S_2 = f(1 + e^{i4\pi\alpha})$$

$$S_3 = f(1 + e^{i6\pi\alpha})$$

e $S_3 = S_6 = S_9$, o que significa que $3\alpha = 1$, ou $\alpha = \frac{1}{3}$.

$$\text{Neste caso} \quad S_1 = f(1 - 0.5) = S_2$$

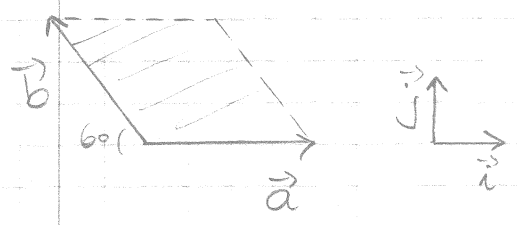
$$\text{e} \quad S_3 = 2f.$$

Com $S_3^2 = 4S_1^2 = 4S_2^2$ o que está

de acordo com os dados experimentais

A posiçao do 2o atomo do motivo e' u v w relativa aos eixos primitivos. Nas se pode dizer muito mais sobre a rede e/ou a estrutura, mas podemos "adicionar" que e' hexagonal de empilhamento denso. Para confirmar que esta estrutura e' consistente com os dados experimentais vamos supor que o plano que contem as reflexoes, \vec{k}_i, \vec{k}_f e \vec{G}_{hkl} , e' perpendicular ao eixo \vec{c} do monocristal.

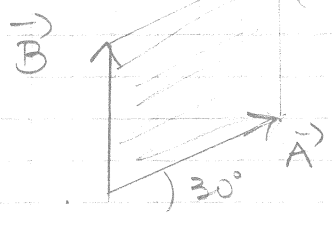
Esta e' uma seccao plana hexagonal da rede real, com vetores primitivos \vec{a} e \vec{b} ($\vec{a} = a \vec{i}$ e $\vec{b} = a (-\frac{1}{2} \vec{i} + \frac{\sqrt{3}}{2} \vec{j})$, $\vec{c} = c \vec{k}$)



os vetores da rede reciproca sao

$$\vec{A} = 2\pi \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})} = \frac{2\pi}{a\sqrt{3}} \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \vec{i} + \frac{1}{2} \vec{j} \right)$$

$$\vec{B} = 2\pi \frac{\vec{c} \times \vec{a}}{\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})} = \frac{2\pi}{a\sqrt{3}} \vec{j}$$



A rede reciproca t.b. e' hexagonal e esta rodada de 30 graus relativa a rede real.

A reflexão passa-se no plano definido por \vec{A} e \vec{B} .

$$\begin{aligned}\vec{G} &= \vec{k}_f - \vec{k}_i = \frac{2\pi}{\lambda} \left(\frac{1}{2} \vec{i} - \frac{\sqrt{3}}{2} \vec{j} - \vec{i} \right) \\ &= \frac{2\pi}{\lambda} \left(-\frac{1}{2} \vec{i} - \frac{\sqrt{3}}{2} \vec{j} \right) \\ &= \frac{2\pi}{\lambda} \frac{a}{2} \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{3}} \left(-\vec{A} - \vec{B} \right) \\ &= \frac{a}{2\lambda} \left(-\vec{A} - \vec{B} \right)\end{aligned}$$

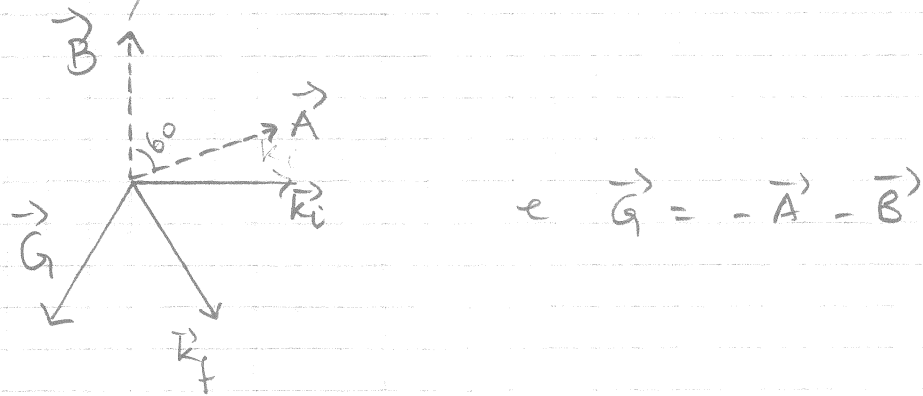
Mas da lei de Bragg $\lambda = d_{hkl}$, $hkl = 110$

$$d_{hkl} = \frac{2\pi}{|\vec{G}_{hkl}|} = \frac{2\pi}{\frac{2\pi}{a} \frac{\sqrt{3}}{2} \left(\frac{3}{4} + \frac{9}{4} \right)^{1/2}} = \frac{a}{2}$$

Ou seja

$$\vec{G} = -\vec{A} - \vec{B}, \text{ ie } h \text{ e } l \text{ existem com coeficiente ímpares.}$$

Geométrica



Endas

$$\begin{aligned}S_{110} &= f \left(1 + e^{i2\pi(hu + kv + lw)} \right) \\ &= f \left(1 + e^{i2\pi(u+v)} \right)\end{aligned}$$

com, $u + v = \frac{1}{3}$ e w arbitrário.

Se $v = 0$, $u = \frac{1}{3}$ e a posição do motivo é $\left(\frac{1}{3}, 0, w \right)$ o que é consistente com uma estrutura hcp.

2.

$$\omega^2 = \frac{2}{M} A \sum_{p>0} \frac{\sin p k_0 a}{pa} (1 - \cos pka)$$

$$\text{e } \frac{\partial \omega^2}{\partial k} = \frac{2A}{M} \sum_{p>0} \sin p k_0 a \sin pka$$

$$= \frac{2A}{M} \sum_{p>0} \frac{1}{2} (\cos (k_0 - k) pa - \cos (k_0 + k) pa)$$

Quando, $k = k_0$

$$\frac{\partial \omega^2}{\partial k} = \frac{A}{M} \sum_{p>0} (1 - \cos 2k_0 pa)$$

que em geral diverge, $\sum_{p=1}^{\infty} 1 \rightarrow \infty$

3. fcc \rightarrow 4 átomos p. célula convencional
valência 3 \rightarrow 4×3 elétrons p. cel. convencional.

$$a) k_F = \left(3 \pi^2 \frac{N}{V} \right)^{1/3}$$

$$n = \frac{N}{V} = \frac{12}{a^3} = 1.8 \times 10^{29} \text{ m}^{-3}$$

$$k_F = 1.7 \times 10^{10} \text{ m}^{-1}$$

$$b) E_F = \frac{1}{2} \frac{\hbar^2 k_F^2}{m^*}$$

$$m^* = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2 E_F}$$

$$m^* =$$

$$c) \text{ vol. da esfera de Fermi: } \frac{4}{3} \pi k_F^3 = V_F$$

$$\text{Vol. da 1ª zona de Brillouin } \left(\frac{2\pi}{a} \right)^3$$

$$\text{e } \tau = \frac{a^3}{4}$$

$$\therefore V_B = \frac{4 (2\pi)^3}{a^3}$$

$$\frac{V_F}{V_B} = \frac{\frac{4}{3} \pi k_F^3}{4 (2\pi)^3 / a^3} = \frac{4/3 \pi^3 \times 12 / a^3}{4 \times 8 \times \pi^3 / a^3} = \frac{3}{2} = \underline{\underline{1.5}}$$

4. O número de elétrons do sistema é

$$N = \frac{V}{4\pi^3} \times \frac{4\pi}{3} (2mE_F/\hbar^2)^{3/2} = \frac{V}{3\pi^2} (2mE_F/\hbar^2)^{3/2}$$

densidade de estados p. unidade de vol do espaço recíproco

A densidade de estados p. a energia de Fermi é

$$D(E_F) = \frac{\sqrt{2} V m^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} E_F^{1/2} = \frac{3}{2} \frac{N}{E_F} \quad \checkmark$$

O calor específico é

$$E_T = E_F + \frac{\pi^2}{6} (kT)^2 D(E_F)$$

$$C_V = \frac{\pi^2}{3} k^2 T D(E_F)$$

$$= \frac{\pi^2}{3} k^2 \frac{3}{2} \frac{N}{E_F} T = \frac{\pi^2}{2} \left(\frac{T}{T_F} \right) K_B N$$

Número de átomos de cobre por unidade de vol

$$n_{Cu} = \frac{6.02 \times 10^{26} \text{ át/kmol} \times 8.8 \times 10^3 \text{ kg/m}^3}{63 \text{ kg/kmol}} = 8.4 \times 10^{28} \text{ át/m}^3$$

O no de elétrons é

$$n = n_{Cu} = 8.4 \times 10^{28} \text{ el./m}^3$$

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3}$$

$$\hbar = 1.055 \times 10^{-34} \text{ Js} = 0.658 \times 10^{-15} \text{ eV s}$$

$$m = 9.1 \times 10^{-31} \text{ kg}$$

$$k_B = 1.38 \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1} = 8.617 \times 10^{-5} \text{ eV K}^{-1}$$

$$C_V^{el} = \frac{\pi^2}{2} \left(\frac{T}{T_F} \right) K_B N$$

$$C_V^{rede} = 3 N K_B \quad \text{a } 1300 \text{ K.} \gg \theta_D$$

$$T_F \sim 81000 \text{ K.}$$

$$\frac{T}{T_F} \text{ a } 1300 \text{ K} \text{ e' } 0.016$$

$$C_V^{el} / C_V^{rede} \approx \frac{\pi^2}{2 \times 3} \left(\frac{T}{T_F} \right) \approx 0.026.$$

Qds, $T \ll T_0$

$$C_V^{rede} \sim T^3$$

$$\text{e } C_V^{el} \sim T$$

enias a uma temp. da ordem de kelvin
este razão torna-se 1.

5. Densidade de átomos de Si

$$n_{Si} = \frac{6,02 \times 10^{26} \text{ átomos/Kmol} \times 2,42 \times 10^3 \text{ Kg/m}^3}{28 \text{ Kg/Kmol}}$$
$$= 5,2 \times 10^{28} \text{ átomos/m}^3.$$

A densidade de dados é

$$n_d = 10^{-10} \times n_{Si} = 5,2 \times 10^{18} \text{ dados/m}^3.$$

$$n_d \gg n_i \text{ ou } p_i$$

A expressão para a condutividade é

$$J = n e \mu_n + p e \mu_p$$

De acordo com a hipótese anterior

podemos $n = n_d$, supondo que todos os dados estão ionizados e $p \approx 0$

$$\therefore J = n_d e \mu_n$$
$$= 0,11 (\Omega m)^{-1}$$

$$e = 1,6 \times 10^{-19} \text{ C.}$$