

FÍSICA DA MATÉRIA CONDENSADA I

2^a chamada

6 de Fevereiro de 1997

1. O NaCl tem uma estrutura cúbica de faces centradas e o seu motivo é formado por um átomo de Na em (000) e um de Cl em $(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$.
 - (a) Com a ajuda do factor de estrutura, determine as reflexões de intensidade nula.
 - (b) Ordene, do ponto de vista das suas intensidades, as quatro primeiras reflexões (baixos ângulos) visíveis num diagrama de pó.

2. Um cristal real tem átomos de impurezas que perturbam a simetria de translacção do meio. Se a impureza for substitucional e tiver massa $M_1 < M$, onde M é a massa dos átomos do cristal, existe um modo de vibração localizado com uma frequência, ω_L , mais alta do que a frequência máxima dos modos de vibração da rede perfeita. Considere um modelo unidimensional com interacções entre primeiros vizinhos e constantes de força todas iguais. Tome a posição do átomo de impureza como origem e escreva as equações de movimento para esse átomo e um dos primeiros vizinhos. Supondo uma solução do tipo exponencial amortecida, para o vector de onda, $q = \frac{\pi}{a}$, (i.e., $u_s = u_0(-1)^s e^{-i\omega t} e^{-\alpha|s|}$) mostre que:

$$\omega_L^2 = \omega_{max}^2 \left(\frac{M^2}{2MM_1 - M_1^2} \right) \quad (2)$$

onde, ω_{max} é a frequência máxima da rede perfeita e a é a constante da rede. Calcule o grau de localização deste modo.

3. Um metal cristaliza numa estrutura tetragonal simples, com 1 átomo por célula unidade, de lados $a = 2\text{Å}$ e $c = 6\text{Å}$. Há dois electrões de valência, por átomo.
 - (a) Determine a forma e dimensões da primeira zona de Brioullin.
 - (b) Qual é a fracção ocupada desta zona, se o potencial for suficientemente forte para que a segunda zona esteja vazia?
 - (c) Calcule a fracção ocupada da primeira zona de Brioullin, se o potencial cristalino for fraco. (O volume de uma calote esférica de altura h é $\frac{\pi}{3}h^2(3r - h)$).
4. (a) Mostre que a variação com t , do vector de onda de um electrão livre, que obedece às leis da dinâmica clássica, num campo eléctrico constante \mathbf{E} , é

$$\mathbf{k}(t) - \mathbf{k}(0) = -e\mathbf{E}t/\hbar \quad (3)$$

- (b) O que acontece à esfera de Fermi destes electrões?
- (c) Mostre que a corrente eléctrica transportada por estes electrões é ne^2Et/m , onde n é a densidade electrónica e os electrões partem do repouso. A lei de Ohm é verificada?

5. Considere um semi-condutor intrínseco. Seja E a energia de um electrão e $D_c(E)$ e $D_v(E)$ as densidades de estados nas bandas de condução e de valência. Admita a condição de não degenerescência e bandas parabólicas (como nas aulas).
- (a) Deduza a expressão para o número de electrões na banda de condução, definindo as constantes que aparecem no resultado.
 - (b) Deduza a expressão para o número de lacunas na banda de valência, definindo as constantes que aparecem no resultado.
 - (c) Deduza a expressão para o potencial químico.
 - (d) Quais dos resultados anteriores permanecem válidos, se o material for dopado com átomos dadores. Justifique.

2ª chamada

1. a) Factor de estrutura

$$S_{\text{NaCl}} = S_{\text{fcc}} \times S_{\text{motivo}}$$

$$\left\{ \begin{aligned} S_{\text{fcc}} &= 1 + e^{-i\pi(h+k)} + e^{-i\pi(h+l)} + e^{-i\pi(k+l)} \\ S_{\text{motivo}} &= f_{\text{Na}} + f_{\text{Cl}} e^{i(h+k+l)} \end{aligned} \right.$$

Mas, $S_{\text{fcc}} = 0$, a não ser que hkl sejam todos pares ou ímpares.

Assim,

$$S_{\text{NaCl}} = 4 \left(f_{\text{Na}} + f_{\text{Cl}} e^{i(h+k+l)} \right)$$

com, hkl todos pares ou todos ímpares.

$$S_{\text{NaCl}} = 4 (f_{\text{Na}} + f_{\text{Cl}}) \quad hkl \text{ pares.}$$

$$S_{\text{NaCl}} = 4 (f_{\text{Na}} - f_{\text{Cl}}) \quad hkl \text{ ímpares.}$$

reflexões de intensidade nula, quando hkl tem paridades diferentes.

$$\begin{array}{ccccc} \text{b) } (111) & (200) & (220) & (311) & (222) \\ 3 & 4 & 8 & 11 & 12. \end{array}$$

4 planos $\{111\}$

$$\begin{array}{l} (111) \quad (-1-1-1) \\ (11-1) \quad (-1-1 \ 1) \\ (1-11) \quad (-1 \ 1-1) \\ (-111) \quad (1 \ 1-1) \end{array}$$

3 plans {200}

200 $\bar{2}$ 00

020 0 $\bar{2}$ 0

002 00 $\bar{2}$

6 plans {220}

220 $\bar{2}$ $\bar{2}$ 0

202 $\bar{2}$ 0 $\bar{2}$

022 0 $\bar{2}$ $\bar{2}$

2 $\bar{2}$ 0 $\bar{2}$ 20

20 $\bar{2}$ $\bar{2}$ 02

0 $\bar{2}$ 2 02 $\bar{2}$

12 plans {311}

311 $\bar{3}$ $\bar{1}$ $\bar{1}$ + 131 ... + 113 ...

$\bar{3}$ 11 3 $\bar{1}$ $\bar{1}$

3 $\bar{1}$ 1 $\bar{3}$ 1 $\bar{1}$

31 $\bar{1}$ $\bar{3}$ $\bar{1}$ 1

$$S_{\text{par}}^2 = 4 (f_{\text{Na}} + f_{\text{Cl}}) \approx 4 \times 28^2 \quad \begin{matrix} Z_{\text{Na}} = 11 \\ Z_{\text{Cl}} = 17 \end{matrix}$$

$$S_{\text{impar}}^2 = 4 (f_{\text{Na}} - f_{\text{Cl}}) \approx 4^2 \times 6^2$$

$$I_{111} \approx 4 \times 4^2 \times 6^2 = 2304 \quad 4^{\ominus}$$

$$I_{200} \approx 3 \times 4^2 \times 28^2 = 37632 \quad 2^{\ominus}$$

$$I_{220} \approx 6 \times 4^2 \times 28^2 = 75264 \quad 1^{\ominus}$$

$$I_{311} \approx 12 \times 4^2 \times 6^2 = 6912 \quad 3^{\ominus}$$

2. Origem no átomo leve, i.e. $\alpha=0$, $S=0$

A sua eq. de movimento é

$$M_1 \frac{d^2 u_0}{dt^2} = C (u_1 + u_{-1} - 2u_0)$$

Para o átomo normal, vizinho da impureza

$$M \frac{d^2 u_1}{dt^2} = C (u_2 + u_0 - 2u_1)$$

A solução para a rede não perturbada era

$$u_s = u \underbrace{\cos s\pi}_{(-1)^s} e^{-i\omega t}$$

Procuramos de um modo localizado, com um máximo para $S=0$, e por isso tentamos.

$$u_s = u_A (-1)^s e^{-i\omega t} e^{-\alpha|s|}$$

ve exponencial, amortecido a partir de $S=0$.

Substituindo esta sol. nas eqs. para u_0 e

u_1 , vem

$$-M_1 \omega^2 = -C (2 + 2e^{-\alpha})$$

$$-M \omega^2 = -C (e^{-\alpha} + e^{\alpha} + 2)$$

$$\text{e } M_1 (e^{-\alpha} + e^{\alpha} + 2) = 2M (1 + e^{-\alpha}) \quad \text{ou}$$

$$e^{\alpha} = \frac{2M - M_1}{M_1}$$

$$\text{e } \omega^2 = \left(\frac{4C}{M} \right) \frac{M^2}{(2MM_1 - M_1^2)}$$

e como $k = \pi/a$, $\omega_{\max} = 2\sqrt{\frac{C}{M}}$, e podemos escrever,

$$\omega^2 = \omega_{\max}^2 \frac{M^2}{2MM_1 - M_1^2}$$

Se escrevermos o amortecimento

como
 $e^{-|\alpha|/l}$

l é o comprimento de amortecimento e

vem

$$l = \frac{1}{\alpha} = \frac{1}{\ln\left(\frac{2M_1 - M_2}{M_2}\right)}$$

Este modo pode ser detectado por absorção infravermelha ou espectroscopia inelástica de nêutrons.

3. a) Prisma tetraédrico de base

$$\frac{2\pi}{a} \text{ e altura } \frac{2\pi}{c}$$

b) A fracção é $\frac{1}{3}$, ie toda a zona está ocupada.

c) Densidade electrónica

$$n = \frac{2}{24 \times 10^{-30}} \text{ m}^{-3} = 8,3 \times 10^{28} \text{ electrões/m}^3$$

$$k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}$$

Na direcção perpendicular à base (\vec{c}) a esfera de Fermi corta as fronteiras da 1ª zona de Brillouin, e o volume que fica fora da zona, corresponde a 2 calotes esféricas de altura

$$h = k_F - \frac{2\pi}{2c} = k_F - \frac{\pi}{c}$$

e raio k_F .

O volume correspondente é

$$2 \times \frac{\pi}{3} \left(k_F - \frac{\pi}{c}\right)^2 \left(3k_F - k_F + \frac{\pi}{c}\right)$$

$$\frac{2\pi}{3} \left(k_F - \frac{\pi}{c}\right)^2 \left(2k_F + \frac{\pi}{c}\right)$$

A fracção ocupada da 1ª zona é então

$$\left[\frac{(2\pi)^3}{a^2 c} - \frac{2\pi}{3} \left(k_F - \frac{\pi}{c}\right)^2 \left(2k_F + \frac{\pi}{c}\right) \right] / \frac{(2\pi)^3}{a^2 c}$$

$$4. a) \vec{F} = m \frac{d\vec{v}}{dt} = -e\vec{E}$$

$$\vec{v}(t) - \vec{v}(0) = -e\vec{E}t/m$$

$$\vec{r}(t) - \vec{r}(0) = -\frac{e\vec{E}t^2}{2m}$$

b) O centro move-se a uma distância $\frac{eEt}{m}$ na direcção de $-\vec{E}$

$$c) \vec{j} = -e\vec{v}(t)n = e^2 n \frac{\vec{E}t}{m}$$

Não, $\vec{j}(t)$ aumenta com t a \vec{E} constante

5. a) concentrações de elétrons na banda de condução

$$n = \int_{E_c}^{\infty} f(E) D(E) dE$$

$$f(E) = \frac{1}{e^{\beta(E-\mu)} + 1} \quad D(E) = C_1 (E - E_c)^{1/2}$$

Suponhamos $E - \mu \gg kT$ $\therefore f(E) \sim e^{-\beta(E-\mu)}$

Pondo $x = \beta(E - \mu)$

$$n = C_1 \int_{E_c}^{\infty} e^{-\beta(E-\mu)} (E - E_c)^{1/2} dE$$

$$= C_1 \beta^{-3/2} e^{-\beta(E_c - \mu)} \int_0^{\infty} e^{-x} x^{1/2} dx$$

$$n = C_1' (kT)^{3/2} e^{-\beta(E_c - \mu)}$$

b) lacunas

A probabilidade de ocupação de lacunas é $1 - f(E)$.

Supomos, $\mu - E_v \gg kT$.

$$p = C_2 \beta^{-3/2} e^{-\beta(\mu - E_v)} \int_0^{\infty} e^{-x} x^{1/2} dx$$

c) semi-condutor intrínseco

$$n = p$$

$$C_1 e^{-(E_c - \mu)/kT} = C_2 e^{-(\mu - E_v)/kT}$$

$$\mu = \frac{1}{2} \left(E_c + E_v - kT \ln \frac{C_1}{C_2} \right)$$

d) a) e b) são válidas p. materiais dopados, mas o potencial químico não é dado por C_1 .