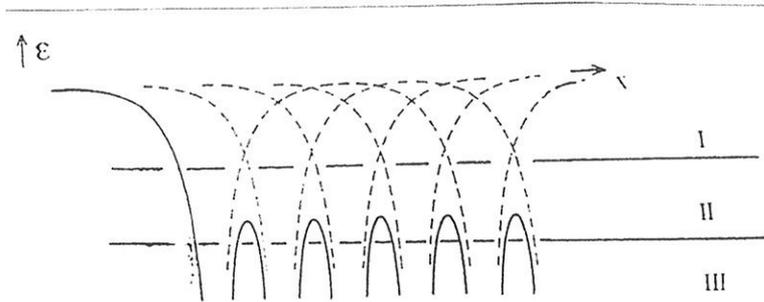
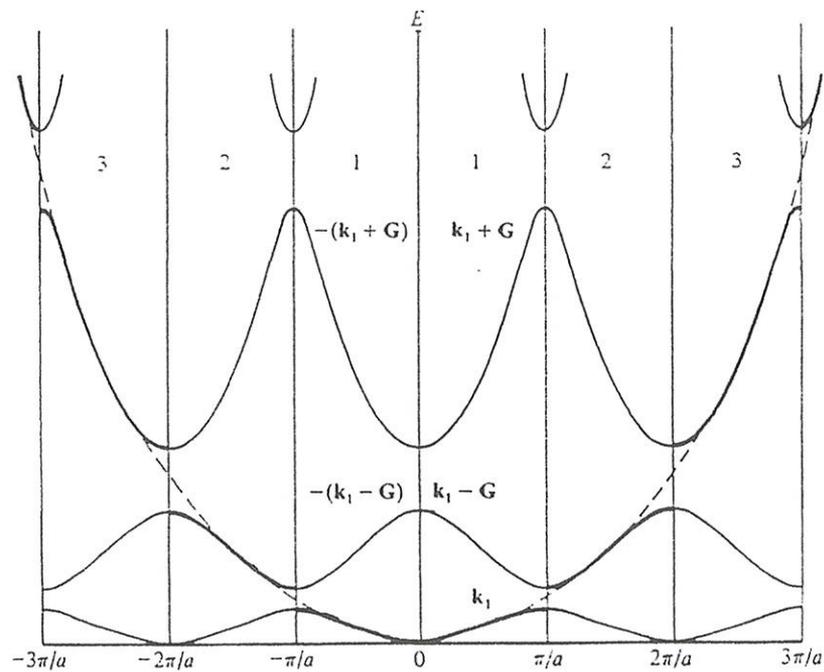


FÍSICA DA MATÉRIA CONDENSADA

Problemas - 4ª Série



- Na figura, as linhas a cheio representam a energia potencial dos elétrons ao longo de uma linha de átomos de um cristal, enquanto a tracejada se representa a energia potencial dos elétrons nos átomos isolados. Diga justificando, qual espera que seja a forma das funções de onda que descrevem os estados dos elétrons nas regiões I, II e III. Em que região se pode utilizar o modelo de elétrons quase-livres e o modelo de elétrons fortemente ligados?

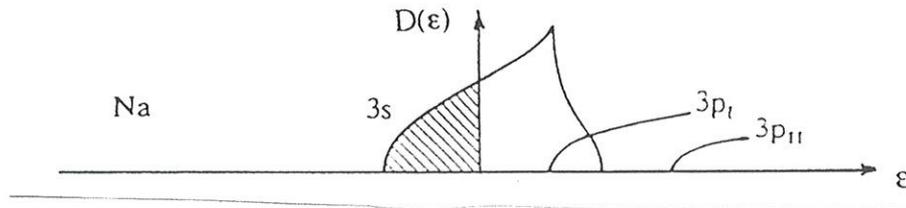


- A figura anterior representa a energia dos estados permitidos para elétrons numa rede monoatômica unidimensional ou a forma da energia dos estados permitidos para os elétrons ao longo de uma direcção de simetria de um cristal tridimensional. Indique nela:

(a) a energia no esquema da zona estendida.

- (b) a energia no esquema da zona reduzida.
 - (c) a energia no esquema da zona periódica.
 - (d) um vector da rede reciproca.
3. (a) Represente as quatro primeiras zonas de Brioullin de uma rede quadrada nos esquemas da zona estendida e reduzida.
 - (b) Considere um cristal bidimensional monoatômico, cuja estrutura é bem descrita por uma rede quadrada de parametro a . Supondo que cada átomo tem quatro electrões de valência, e que os estados desses electrões no cristal são bem descritos pelo modelo dos electrões quase-livres, represente no esquema da zona reduzida e no esquema da zona periódica, os volumes do espaço dos k que correspondem a estados preenchidos.
4. (a) Mostre que as condições aos limites periódicas, no caso tridimensional geral para um sólido com N_1 , N_2 e N_3 células unidade respectivamente nas direcções dos vectores primitivos \mathbf{a} , \mathbf{b} e \mathbf{c} conduzem a uma quantificação dos vectores de propagação \mathbf{k} .
 - (b) Mostre que todos os valores independentes de \mathbf{k} se podem considerar contidos na primeira zona de Brioullin.
5. (a) Diga o que é um electrão de Bloch e o que designa por banda de energia.
 - (b) Mostre que no caso de electrões quase-livres a única diferença na relação de dispersão para a energia ocorre para valores de \mathbf{k} próximos dos correspondentes à difracção de Bragg.
 - (c) Considerando a densidade de estados no espaço dos \mathbf{k} diga quantos estados electrónicos contém uma banda de electrões quase-livres.
6. (a) Calcule a expressão da densidade de estados de electrões, em função da energia, $D(E)$, no caso do modelo de electrões livres para:
 - i. uma rede unidimensional
 - ii. uma rede bidimensional
 - iii. uma rede tridimensional
 - (b) Se uma banda de electrões quase-livres tiver um máximo em $E = E_0$ para $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$, qual é a expressão da densidade de estados perto desse máximo?
 - (c) Esquematize a forma da densidade de estados quando a energia varia entre o mínimo e o máximo de uma banda de electrões quase-livres.
7. Considerando o modelo de electrões livres válido para um metal alcalino com uma densidade atômica $1.9 \times 10^{22} \text{at/cm}^3$, determine:
 - (a) a energia em função de \mathbf{k} .
 - (b) a densidade de estados em função da energia e represente-a graficamente.
 - (c) a energia de Fermi.

8. Considere um material com uma estrutura cúbica simples de parâmetro a , em que cada átomo fornece dois electrões para os níveis de electrões quase-livres.
- Diga justificando se este material deve ser considerado condutor ou isolante.
 - Represente esquematicamente a forma das bandas nas direcções $[100]$, $[110]$ e $[111]$.
9. O sódio é um metal com uma estrutura cúbica centrada de parâmetro $a = 4.23A$ ($\rho = 0.97g/cm^3$ e $M = 23a.m.u.$) e tem a configuração atómica $[Ne]3s^1$.
- Diga justificando, se a banda $3s$ pode ser considerada no modelo de electrões livres ou se tem que se admitir a aproximação de electrões quase-livres. (Sugestão: compare o raio da esfera de Fermi com o raio da primeira zona de Brioullin quando aproxima esta por uma esfera.)
 - Calcule a energia de Fermi.



- A figura representa a densidade de estados em função da energia para o sódio. A forma desta função está de acordo com a conclusão da alínea anterior? Justifique.
- A aproximação utilizada em a) de substituir a 1ª zona de Brioullin por uma esfera é razoável? Porquê?