

FÍSICA DA MATÉRIA CONDENSADA

Problemas - 3ª Série

1. Considere uma cadeia monoatômica unidimensional de parâmetro a com interações entre primeiros vizinhos. Supondo que a interação dominante para desvios das posições de equilíbrio 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 superfície 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 monoatômica unidimensional de parâmetro a com interações entre n vizinhos.
- (a) Determine o espectro de vibrações possíveis 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 interações apenas entre primeiros vizinhos.
3. Considere uma rede cristalina a uma temperatura finita T , tal que a amplitude de vibração dos átomos em torno da respectiva posição de equilíbrio é pequena.
- (a) Escreva uma expressão geral para a energia potencial em termos dos deslocamentos $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ em relação à posição de equilíbrio \mathbf{r}_0 , no quadro da aproximação harmónica e o hamiltoniano respectivo.
- (b) Por analogia com o caso do oscilador harmónico quântico escreva o hamiltoniano 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.
4. (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.
5. 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

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

onde os simbolos têm os significados usuais.

6. (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.
7. (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.
8. 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 $\langle 10 \rangle$ para a mesma rede, considerando os estados contidos na primeira zona de Brioullin. Compare com a densidade de estados calculada no modelo de Debye.
9. (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 anarmónicos no hamiltoneano considerado na alinea anterior é possivel obter expansão térmica. Explique os diferentes termos introduzidos em termos de interacções entre fonões.