Problemas de fonões

Ricardo Mendes Ribeiro

7 de Março de 2022

Fonões

1. Considere a cadeia de massas m ligadas por molas de constante elástica κ_2 que foi estudada na aula teórica.
   (a) Calcule as velocidades de fase e de grupo para esse sistema.
   (b) Determine a velocidade do som.
   (c) Calcule a densidade de estados $g(\omega)$ desse sistema.
   (d) Neste sistema, a capacidade calorífica é dada por

   $$C = \frac{\partial U_{total}}{\partial T} = \frac{\partial}{\partial T} \int d\omega g(\omega)\hbar\omega \left(n_B(\beta\hbar\omega) + \frac{1}{2} \right)$$

   em que se pode expandir o factor de Bose para altas temperaturas:

   $$n_B(\beta\hbar\omega) + \frac{1}{2} = \frac{k_B T}{\hbar\omega} + \frac{1}{12}\frac{\hbar\omega}{k_B T} + \cdots$$

   Verifique essa expansão.
   (e) Usando o resultado da alínea anterior, mostre que

   $$\frac{C}{N} = k_B \left(1 - \frac{A}{T^2} + \cdots \right)$$
   $$A = \frac{\hbar^2 \kappa_2}{6mk_b^2}$$

2. Generalize o modelo de uma cadeia de massas m ligadas por molas de constante elástica κ_1 para o caso em que se acrescenta uma mola a ligar os segundos vizinhos, com constante elástica κ_2.
   (a) Determine a curva de dispersão $\omega(k)$ para este modelo.
   (b) Determine a velocidade do som.
   (c) Verifique que a velocidade de grupo é zero na fronteira da zona de Brillouin.

3. Na curva de dispersão da cadeia monoatómica, há um máximo de frequência ω_{max}. Se se aplicar uma frequência de valor superior $\omega > \omega_{max}$ não haverá propagação da

onda, mas sim um decaimento da amplitude a partir do ponto onde é aplicada a força externa. Resolva a equação

$$\omega = 2\sqrt{\frac{\kappa_2}{m}}\left|\sin\left(\frac{ka}{2}\right)\right|$$

para o caso $\omega > \omega_{max}$ usando um número de onda k complexo, para determinar o comprimento de decaimento desta onda evanescente.

4. Considere uma cadeia de massas idênticas m em que as massas para $n < 0$ estão ligadas por uma mola de constante elástica κ_L e para $n > 0$ estão ligadas por uma mola de constante elástica κ_R. Uma onda de amplitude I incide da esquerda e pode ser transmitida com uma amplitude T ou reflectida com uma amplitude R. Assumindo o ansatz

$$\delta x_n = \begin{cases} Te^{i\omega t - \kappa_L na} & n \geq 0 \\ Ie^{i\omega t - \kappa_R na} + Re^{i\omega t + \kappa_R na} & n < 0 \end{cases}$$

determine $\frac{T}{I}$ e $\frac{R}{I}$ em função de m, ω, κ_L e κ_R.

5. Considere uma cadeia de massas m idênticas, unidas por molas de constante elásticas κ_1, excepto a massa na posição $n = 0$ que tem massa $M < m$. Utilize o ansatz

$$\delta x_n = Ae^{i\omega t - q|n|a}$$

para determinar a frequência do modo desta impureza.

6. Considere uma cadeia diatómica, em que os átomos têm massas m_1 e m_2 e estão unidos por molas de constante elástica κ_1. A célula unitária tem tamanho a.
   (a) Determine a relação de dispersão para as oscilações longitudinais deste sistema.
   (b) Determine as frequências dos dois modos (óptico e acústico) para $k = 0$ e na fronteira da zona de Brillouin.
   (c) Determine a velocidade do som.

7. Considere uma cadeia diatómica geral, com massas m_1 e m_2 e constantes elásticas κ_1 e κ_2, alternadas. Calcule a relação de dispersão para este sistema.

8. Generalize o modelo de uma cadeia diatómica de massas m_1 e m_2 ligadas por molas de constante elástica κ_1 para o caso em que se acrescenta uma mola a ligar os segundos vizinhos, com constante elástica κ_2.

9. Considere agora uma cadeia triatómica, de massas m_1, m_2 e m_3 e constantes elásticas κ_1, κ_2 e κ_3. Calcule a relação de dispersão para este sistema.

(Obtém-se uma equação polinomial do terceiro grau, que pode ser resolvida com um software como o *Mathematica* ou o *MatLab*, e desenhado o gráfico.)