Universidade do Minho

Problemas de Física da Matéria Condensada – Série 2

1- Considere um cristal de rede cúbica com um átomo na célula primitiva e uma onda que se propaga segundo um dos três eixos Cartesianos. O correspondente movimento de vibração elástica do plano s em torno da posição de equilíbrio é descrito pela equação,

$$M\frac{d^2u_s}{dt^2} = \sum_{l=\pm 1} C_l\,[u_{s+l} - u_s]\,,$$

onde M é a massa dos átomos nesse plano, a constante de força é tal que $C_l = C_{-l}$ e

$$\begin{aligned} u_s &= ue^{i[ska-\omega t]}\,, \\ u_{s+l} &= ue^{i[(s+l)ka-\omega t]}\,, \end{aligned}$$

são os desvios dos planos s e $s+l$, respetivamente. Já que no presente caso se tem que $l = \pm 1$, a força a que o plano s está sujeito é causada pelos desvios dos planos vizinhos $s-1$ e $s+1$, sendo proporcional à diferença dos desvios, $u_{s\pm 1} - u_s$.

a)- Derive o espetro de energia, $\omega = \omega(k)$, das ondas correspondentes aos fonões associados a estas vibrações elásticas dos planos dos átomos da rede.

b)- Represente graficamente o espetro obtido.

c)- Será que da forma deste espetro se pode concluir que os fonões associados às ondas elásticas são acústicos ou óticos? Justifique a sua resposta.

2- Considere um cristal de rede cúbica com um átomo na célula primitiva e uma onda que se propaga segundo um dos três eixos Cartesianos. O correspondente movimento de vibração elástica do plano s em torno da posição de equilíbrio é descrito pela equação,

$$M\frac{d^2u_s}{dt^2} = \sum_{j} C_j\,[u_{s+j} - u_s]\,,$$

onde a soma em j é sobre todos os inteiros menos zero, $j = \pm 1, \pm 2, ..., \pm\infty$, M é a massa dos átomos nesse plano e a constante de força C_j tem a seguinte forma,

$$C_j = A\,\frac{\sin(j\,k_0\,a)}{j\,a}\,,$$

onde A e k_0 são constantes e $0 < k_0 < \frac{\pi}{a}$. Como no problema anterior, tem-se que os desvios dos planos s e $s+j$ são tais que,

$$\begin{aligned} u_s &= u e^{i[ska-\omega t]}, \\ u_{s+j} &= u e^{i[(s+j)ka-\omega t]}, \\ &\text{onde } ka \in [-\pi, \pi]. \end{aligned}$$

Ao contrário do problema anterior, no presente caso a força a que o plano s está sujeito é causada pelos desvios de todos os planos $s+j$ tais que $j = \pm 1, \pm 2, ..., \pm\infty$. Note ainda que C_j decresce à medida que $|j|$ aumenta, que é o comportamento esperado para cristais metálicos. (Faz-se notar que $k = -\pi/a$ e $k = \pi/a$ são considerados um e o mesmo vetor de onda, por diferirem de um vetor da rede recíproca).

a)- Derive $\omega^2 = \omega^2(k)$ e o correspondente espetro de energia $\omega = \omega(k)$ das ondas correspondentes aos fonões associados a estas vibrações elásticas dos planos dos átomos da rede.

b) Calcule também as expressões de $\partial\omega^2/\partial k$ e $\partial\omega/\partial k$ e mostre que tais derivadas são tais que $\partial\omega^2/\partial k|_{k=k_0} = \infty$ e $\partial\omega/\partial k|_{k=k_0} = \infty$. (Tal significa que a tangente às funções $\omega^2(k)$ e $\omega(k)$ é vertical em $k = k_0$. Quando tal ocorre, diz-se que a dispersão $\omega(k)$ tem um *kink* em $k = k_0$).

c) Trata-se dum modo acústico ou ótico? Justifique a sua resposta.

3- Considere um cristal de rede cúbica com constante de rede a e dois átomos de massas M_1 e M_2, respetivamente, na célula primitiva. Segundo a direção de vibração elástica correspondente a um dos eixos Cartesianos, dispõem-se alternadamente átomos de massa M_1 e M_2. Logo, podem-se definir planos que contêm átomos de massa M_1 e M_2, respetivamente. Cada um desses planos interage apenas com os planos vizinhos, sendo as respetivas constantes de força C iguais entre todos os pares de planos. Assim, o movimento de vibração elástica dos planos vizinhos em torno das posições de equilíbrio é descrito pela equações,

$$\begin{aligned} M_1 \frac{d^2 u_s}{dt^2} &= C\left[v_s + v_{s-1} - 2u_s\right], \\ M_2 \frac{d^2 v_s}{dt^2} &= C\left[u_{s+1} + u_s - 2v_s\right], \end{aligned}$$

onde u_s e v_s são os desvios dos planos alternados com átomos de massa M_1 e M_2, respetivamente, relativamente às posições de equilíbrio.

a)- Considere soluções na forma de ondas planas de vetor de onda k com amplitudes u e v em planos alternados. Derive as equações lineares e homogénias correspondentes às equações dadas.

b) Derive a equação que se obtem da condição do determinante dos coeficientes u e v ter que ser nulo, para que as equações da alínea anterior tenham uma solução não trivial.

c) Derive os dois espetros de energia, $\omega = \omega(k)$, das ondas correspondentes aos fonões associados a estas vibrações para o intervalo de vetor de onda $k \in [-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}]$.

d) Derive as expressões dos dois espetros de energia da alínea anterior no limites em que $|ka| << 1$ e $(\pi - |ka|) << 1$.

e)- Represente graficamente os espetros obtidos na alínea c) e indique qual se refere a modos acústicos e óticos. Justifique a sua resposta.

4- Considere um conjunto de osciladores harmónicos idênticos em equilíbrio térmico. Derive a distribuição de Planck para esse sistema, que corresponde à ocupação média dum modo fonónico em equilíbrio térmico à temperatura T.

5- Considere o espetro de energia $\omega = \omega(k)$ dos fonões numa rede de N átomos com um átomo por célula primitiva calculado no problema 1. Derive a densidade de modos desse sistema e expresse-a em termos da diferença $(\omega_m^2 - \omega^2)$ onde ω_m é a frequência máxima.

6- Suponha que o espetro dum ramo fonónico tem, a três dimensões, a seguinte forma,

$$\omega(k) \;\; = \;\; \omega_0 - A\,k^2 \;\text{ onde }\; \omega_0 > A\,\pi^2/a^2$$

e $k \in \left[-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\right]$ é o vetor de onda, a a constante da rede e A uma constante com dimensões apropriadas.

a) Trata-se dum modo acústico ou ótico? Justifique a sua resposta.

b) Determine a densidade de modos para $\omega < \omega_0$ e mostre que é nula para $\omega > \omega_0$.

7- Segundo o modelo de Debye, a energia térmica duma rede de N átomos cujo correspondente movimento vibratório inclua três polarizações é, para temperaturas absolutas $T << \theta$ muito baixas, dada por,

$$U \;\; \approx \;\; 9Nk_BT\left(\frac{T}{\theta}\right)^3 \int_0^{\theta/T} dx\,\frac{x^3}{e^x - 1}\,,$$

onde $\theta = \hbar\omega_0/k_B$ é a temperatura de Debye.

Calcule a capacidade calorífica da rede considerando que $T << \theta$. Confirme que a mesma é proporcional a T^3.

Dados auxiliares

Expressões úteis:

$$\begin{aligned}
\cos(a+b) &= \cos(a)\cos(b) - \sin(a)\sin(b) \\
\sin(a+b) &= \sin(a)\cos(b) + \cos(a)\sin(b) \\
\cos(a)\cos(b) &= \frac{1}{2}[\cos(a-b) + \cos(a+b)] \\
\sin(a)\sin(b) &= \frac{1}{2}[\cos(a-b) - \cos(a+b)] \\
\sin(a)\cos(b) &= \frac{1}{2}[\sin(a-b) + \sin(a+b)]
\end{aligned}$$

Somas úteis:

$$\sum_{j=1}^{\infty} \frac{\sin(j\,x)}{j} = \frac{\pi - x}{2}\;;\quad 0 < x < 2\pi$$

$$\sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{x^j} = \frac{1}{x-1}\;;\quad x \geq 1$$

$$\sum_{j=0}^{\infty} j\,x^j = x\,\frac{d}{dx}\,x^j = \frac{x}{(1-x)^2}\;;\quad x \geq 1$$

$$\sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{j^4} = \frac{\pi^4}{90}$$

Integral útil:

$$\int_0^{\infty} dx\,x^3\,e^{-j\,x} = \frac{6}{j^4}$$

para j positivo e inteiro.

Expressão aproximada útil, válida para $x << 1$:

$$\sqrt{1+x} \approx 1 + \frac{x}{2}$$