

I

Considere um gás de electrões livres 3d, confinado a um volume V .

- (a) Expresse o módulo do vector de onda de Fermi como função da densidade de electrões (n).
- (b) Obtenha a densidade de estados electrónicos em função da energia ($g(E)$).
- (c) Mostre que, a $T=0K$, a energia média por electrão é $\frac{E}{N} = \frac{3}{5} E_F$.

II

Admita que impõe condições de fronteira periódicas a uma cadeia de átomos 1-dim. (com N átomos, N par). Mostre então que o teorema de Bloch (expresso na forma $\psi_k(x+L) = e^{ikL} \psi_k(x)$) implica que existem N k 's fisicamente distintos.

III

- (a) Use a aproximação dos electrões quase-ligados para calcular a relação de dispersão $E(k)$ para uma cadeia de átomos idênticos separados entre si de uma distância b . Admita que as orbitais atómicas relevantes são não-degeneradas e considere apenas interações entre vizinhos imediatos.
- (b) Se cada átomo contribua com um electrão para a banda de energia, comporte-se o sistema como condutor ou isolador (a $T=0K$).

IV

(a) Mostre a equivalência entre as formulações de Bragg e de von Laue para a interferência construtiva da radiação difratada por um cristal.

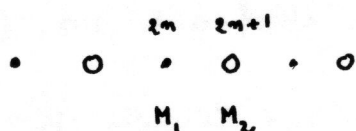
(b) Obtenha o fator de estrutura de uma rede cúbica de corpo centrado e explicita as regras de extinção que serão observadas se indexar as reflexões à rede recíproca do cubo convencional.

□

Nota para o problema III:

$$[\epsilon(\vec{r}) - \epsilon_m] b_m = - [\epsilon(\vec{r}) - \epsilon_m] b_m \sum_{\vec{R} \neq 0} \int e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \psi_m^*(\vec{r}) \psi_m(\vec{r} - \vec{R}) d\vec{r} + b_m \int \psi_m^*(\vec{r}) \Delta U \psi_m(\vec{r}) d\vec{r} + b_m \sum_{\vec{R} \neq 0}' \int e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \psi_m^*(\vec{r}) \Delta U \psi_m(\vec{r} - \vec{R}) d\vec{r}$$

1. Considere uma cadeia $d=1$ com dois átomos por célula unitária.



Admita que existem apenas interações harmónicas entre vizinhos imediatos.

Obtenha as relações de dispersão correspondentes, identificando o ramo óptico e acústico.

2. A energia térmica de um gás de fónons é dada, na aproximação de Einstein, por:

$$U = \frac{N \hbar \omega}{e^{\hbar \omega / kT} - 1}$$

- a) Obtenha o calor específico $C_V(T)$ nesta aproximação
b) Mostre que $C_V(T \rightarrow 0) \rightarrow 0$; compare $C_V(T \ll 1)$ nesta aproximação, com o comportamento experimental observado num isolado?

3. a) Partindo da função dieléctrica de Lorentz, para um modo vibracional polar:

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_\infty + \frac{\Delta \epsilon \Omega_{LO}^2}{\Omega_{LO}^2 - \omega^2} \quad (*)$$

mostre que $\frac{\epsilon(0)}{\epsilon_\infty} = \frac{\Omega_{LO}^2}{\Omega_{TO}^2}$ (relação de Lyddane-Sachs-Teller).

Justifique convenientemente.

3b) Considere agora que uma onda electromagnética (fótons) incide sobre um meio cuja função de susceptibilidade é descrita por (*). Obtenha as relações de dispersão características das excitações que resultam do acoplamento entre fótons e fónons TO (polaritons). Discuta o seu comportamento no limite $k \rightarrow 0$ e $k \rightarrow \infty$.

Pista: $w = \frac{c}{\sqrt{\epsilon(\omega)}} k$