

## Universidade do Minho

### Problemas de Física da Matéria Condensada – Série 4

Consideram-se  $N$  eletrões no interior de cristais de dimensão 1, 2 e 3, de forma linear, quadrada e cúbica, respetivamente. Seja  $L$  o comprimento, o lado e a aresta de cada cristal, respetivamente. O número de eletrões é para os três cristais dado por:

$$N = \int_0^\infty d\varepsilon f(\varepsilon) \mathcal{D}(\varepsilon)$$

Nesta equação  $f(\varepsilon)$  é a distribuição de Fermi Dirac e  $\mathcal{D}(\varepsilon)$  representa a densidade de estados cuja expressão foi estudada na série de problemas 3 para cristais de forma linear, quadrada e cúbica

Considera-se que tais cristais são metálicos e que a superfície de Fermi está inteiramente contida na primeira zona de Brillouin. Assim, é uma muito boa aproximação considerar que os respetivos eletrões de condução não colidem com a rede. Como na série 3, na resolução dos seguintes problemas deve utilizar-se a aproximação dos eletrões livres para descrever os eletrões de condução dos três cristais metálicos. Omite-se, pois, um tratamento explícito da rede.

1- Com o objetivo final de determinar o potencial químico dos três cristais para temperaturas baixas, tais que  $T \ll \varepsilon_F/k_B$ , responda às seguintes alíneas:

a)- Derive uma equação para o potencial químico no limite de temperaturas baixas, tais que  $T \ll \varepsilon_F/k_B$ . Na resolução deste problema, deve tomar em consideração que para essa gama de temperaturas o número  $N$  de eletrões é aproximadamente dado por:

$$N \approx \int_0^{\varepsilon_F - k_B T} d\varepsilon \mathcal{D}(\varepsilon) + \int_{\varepsilon_F - k_B T}^{\varepsilon_F + k_B T} d\varepsilon f(\varepsilon) \mathcal{D}(\varepsilon)$$

b)- Verifique se a forma das três equações obtidas corresponde a

$$\ln \left( \frac{1 + e^{(\varepsilon_F - \mu)/k_B T + 1}}{1 + e^{(\varepsilon_F - \mu)/k_B T - 1}} \right) = 2 \left[ 1 + \frac{1}{d} \frac{\varepsilon_F}{k_B T} \left[ \left( 1 - \frac{k_B T}{\varepsilon_F} \right)^{d/2} - 1 \right] \right]$$

onde  $d = 1, 2, 3$ , consoante a dimensão do cristal.

c)- Baseado na equações obtidas nas alíneas anteriores, e utilizando a seguinte aproximação válida para temperaturas baixas, tais que  $T \ll \varepsilon_F/k_B$ ,

$$\left( 1 - \frac{k_B T}{\varepsilon_F} \right)^{d/2} \approx 1 - \frac{d}{2} \frac{k_B T}{\varepsilon_F}$$

verifique que para essas temperaturas o potencial químico é dado por  $\mu = \varepsilon_F$ .

2- No limite de temperaturas baixas tais que  $T \ll \varepsilon_F/k_B$ , a energia eletrônica pode ser aproximada por:

$$U \approx \int_0^{\varepsilon_F - k_B T} d\varepsilon \mathcal{D}(\varepsilon) \varepsilon + \int_{\varepsilon_F - k_B T}^{\varepsilon_F + k_B T} d\varepsilon f(\varepsilon) \mathcal{D}(\varepsilon) \varepsilon$$

Na expressão de  $f(\varepsilon)$  considera-se aqui que  $\mu = \varepsilon_F$ . Na série 3 derivaram-se as seguintes expressões para a densidade de estados  $\mathcal{D}(\varepsilon)$ :

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(\varepsilon) &= \frac{N}{2 \varepsilon_F^{\frac{1}{2}} \varepsilon^{\frac{1}{2}}} && \text{cristal linear} \\ \mathcal{D}(\varepsilon) &= \frac{N}{\varepsilon_F} && \text{cristal quadrado} \\ \mathcal{D}(\varepsilon) &= \frac{3N \varepsilon^{\frac{1}{2}}}{2 \varepsilon_F^{\frac{3}{2}}} && \text{cristal cubico} \end{aligned}$$

Sabendo que inicialmente os cristais estavam a uma temperatura  $T_1 > 0$  e que posteriormente foram aquecidos para uma temperatura  $T_2 > T_1$ , indique qual o aumento da energia dos elétrons devido a essa subida de temperatura.

Para a resolução desse problema, use as expressões da densidade de estados acima dadas e, como estamos a considerar que  $T \ll \varepsilon_F/k_B$ , utilize as seguintes aproximações nos seus cálculos:

$$\left(1 - \frac{k_B T}{\varepsilon_F}\right)^{3/2} \approx 1 - \frac{3}{2} \frac{k_B T}{\varepsilon_F} + \frac{3}{8} \left(\frac{k_B T}{\varepsilon_F}\right)^2,$$

$$\left(1 - \frac{k_B T}{\varepsilon_F}\right)^2 \approx 1 - 2 \frac{k_B T}{\varepsilon_F} + \left(\frac{k_B T}{\varepsilon_F}\right)^2,$$

$$\left(1 - \frac{k_B T}{\varepsilon_F}\right)^{5/2} \approx 1 - \frac{5}{2} \frac{k_B T}{\varepsilon_F} + \frac{15}{8} \left(\frac{k_B T}{\varepsilon_F}\right)^2$$

3- Determine a energia eletrônica do estado fundamental ( $T = 0K$ ) dos três cristais, recorrendo à seguinte expressão exata:

$$U = \int_0^\infty d\varepsilon \varepsilon f(\varepsilon) \mathcal{D}(\varepsilon)$$

4- Para baixas temperaturas a capacidade calorífica eletrônica pode ser escrita como:

$$C_{el} \approx \int_0^\infty d\varepsilon (\varepsilon - \varepsilon_F) \frac{\partial f(\varepsilon, T)}{\partial T} \mathcal{D}(\varepsilon_F)$$

Com base neste resultado, calcule expressões para a capacidade calorífica para os três casos. Use  $\mu = \varepsilon_F$ .

5- Considere-se agora que para o cristal metálico com rede cúbica os eletrões de condução correspondem a grupos de onda com uma pequena incerteza no momento e uma incerteza na posição correspondente a alguns milhares de constantes de rede  $a$ . Nesse caso, a interação com campos elétricos estáticos e campos magnéticos uniformes pode ser descrita por equações de movimento clássicas. Considere-se ainda que num instante a que chamamos zero foi aplicado a tal cristal um campo elétrico estático  $\vec{E}$  durante um intervalo de tempo  $t$ .

a) Calcule o desvio do vetor de onda  $\vec{k}$  devido à aplicação do campo ao fim do tempo  $t$ , na ausência de colisões dos eletrões.

b) Derive o desvio do vetor de onda  $\vec{k}$  devido à aplicação do campo, sabendo que o tempo médio  $\tau$  entre as colisões dos eletrões é muito menor que o tempo  $t$ .

c) Faça duas figuras em que representa, esquematicamente, a superfície de Fermi do cristal nos instantes zero e  $t$ , no caso da alínea anterior.

d) Sabendo que a densidade de corrente eléctrica é dada por  $\vec{j} = -en\vec{v}$  onde  $-e$  é a carga eletrónica,  $n$  a densidade eletrónica e  $\vec{v}$  a velocidade média dos eletrões, tendo como base o resultado da alínea anterior derive as expressões da condutividade eléctrica  $\sigma$  e resistividade eléctrica  $\rho$ .

e) Como se designa a expressão da condutividade eléctrica obtida na alínea anterior?

6- Considere que o mesmo cristal metálico de rede cúbica tem faces retangulares e que lhe foram aplicados um campo elétrico estático  $\vec{E}$  e um campo magnético uniforme  $\vec{B}$  durante um intervalo de tempo  $t$ , sendo o tempo médio  $\tau$  entre as colisões dos eletrões muito menor que o tempo  $t$ . Escolha um sistema de eixos Cartesianos tal que cada um dos três eixos é perpendicular a duas das faces opostas do cristal e considere que a direção e sentido do campo  $\vec{B}$  correspondem aos do eixo  $OZ$ .

a) Derive as equações que definem as componentes da velocidade média dos eletrões  $\vec{v}$  devida à aplicação dos campos ao fim do tempo  $t$ .

b) Considere agora que a direção e sentido do campo elétrico estático aplicado  $\vec{E}$  correspondem aos do eixo  $OX$  e os do campo  $\vec{B}$  aos do eixo  $OZ$ . Sabendo que só pode fluir corrente eléctrica segundo o eixo  $OX$ , por apenas as duas faces

retangulares perpendiculares a esse eixo estarem soldadas a fios condutores externos ao cristal, mostre que embora o campo elétrico aplicado aponte no eixo  $OX$ , surge no cristal um campo elétrico emergente segundo o eixo  $OY$  e calcule a correspondente componente  $E_y$  desse campo.

c) Como se designa o efeito associado ao sistema considerado na alínea anterior?

### Dados auxiliares

Primitivas úteis:

$$\int dx \frac{1}{1 + a e^x} = x - \ln(1 + a e^x)$$

e

$$\int dx x^n = \frac{x^{1+n}}{1+n},$$

onde  $a$  é um número real e  $n$  um número inteiro ou semi-inteiro, positivo ou negativo.

Integral útil:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{x^2 e^x}{(1 + e^x)^2} = \frac{\pi^2}{3}$$