Universidade do Minho

Problemas de Física da Matéria Condensada – Série 3

Em metais ideais com a superfície de Fermi inteiramente contida na primeira zona de Brillouin, é uma ótima aproximação considerar que os respetivos eletrões de condução não colidem com a rede. Assim, utilize na resolução dos seguintes problemas a aproximação dos eletrões livres para descrever os eletrões de condução de cristais metálicos de várias geometrias.

1- Comece por considerar um cristal cuja forma deve representar por uma *caixa* unidimensional (segmento de reta) de comprimento L. No cristal circulam eletrões que se descrevem individualmente pelo Hamiltoniano livre com equação de valores próprios da energia,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi_k(x) \quad = \quad \epsilon_k\,\psi_k(x)\,.$$

Estes eletrões, embora descritos pelo Hamiltoniano livre, têm o seu movimento restringido por um constragimento, o de não poderem sair da *caixa* unidimensional (segmento de reta) de comprimento L que representa o cristal. Tal constragimento impõe que as funções de onda $\psi_k(x) = C\,e^{ikx}$ dos estados próprios da energia, onde C é uma constante, obedeçam à condição de fronteira periódica,

$$\psi_k(x) \quad = \quad \psi_k(x+L)\,.$$

a) Confirme que para a energia correspondente ao Hamiltoniano livre se tem que $\psi_k(x) = C\,e^{ikx}$ é solução da equação de valores próprios da energia.

b)- Derive os valores próprios do operador $\hat{k}$ e do Hamiltoniano livre determinados pela condição de fronteira periódica.

2- Considere o sistema da alínea anterior com N eletrões livres. Sabendo que cada estado quântico é, para lá do vetor de onda k, caraterizado pela projeção de spin cujos valores possíveis são $\frac{1}{2}$ e $-\frac{1}{2}$, determine a relação entre o vetor de onda de Fermi, k_F, e a concentração eletrónica na cadeia, $n_e = \frac{N}{L}$, no estado fundamental ($T = 0$).

3- Considere um cristal cúbico de aresta L onde circulam N eletrões de condução que são descritos individualmente por um Hamiltoniano livre com equação de valores próprios da energia,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad = \quad \epsilon_{\vec{k}}\,\psi_{\vec{k}}(\vec{r})\,.$$

Tais eletrões, embora descritos pelo Hamiltoniano livre, têm o seu movimento restringido por um constragimento: O de não poderem sair da *caixa* cúbica de aresta L que representa o cristal. Este constragimento impõe que as funções de onda $\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = C\, e^{i\vec{k}.\vec{r}}$ dos estados próprios da energia, onde C é uma constante, obedeçam às condições de fronteira periódicas,

$$\begin{aligned} \psi_{\vec{k}}(x,y,z) &= \psi_{\vec{k}}(x+L,y,z) \\ &= \psi_{\vec{k}}(x,y+L,z) \\ &= \psi_{\vec{k}}(x,y,z+L)\,. \end{aligned}$$

a)- Confirme que para a energia correspondente ao Hamiltoniano livre se tem que $\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = C\, e^{i\vec{k}.\vec{r}}$ é solução da equação de valores próprios da energia.

b)- Determine os valores próprios k_x, k_y e k_z dos operadores componente de vetor de onda $\hat{k}_x$, $\hat{k}_y$ e $\hat{k}_z$, respetivamente, que são permitidos pelas condições de fronteira periódicas.

c)- Derive os valores próprios da energia que são permitidos pelas mesmas condições de fronteira periódicas.

4- Considere três cristais de forma linear, quadrada e cúbica de comprimento, lado e aresta L, respetivamente, que contêm N eletrões livres cujas funções de onda obedecem às condições de fronteira periódicas.

a)- Como na questão 2 para o caso do cristal de forma linear, derive para os outros dois cristais aqui considerados a relação entre k_F e a densidade eletrónica, n_e.

b)- Derive a a densidade de estados $\mathcal{D}(\epsilon)$ para cada um dos três cristais e expresse-a somente em termos de N, energia de Fermi ϵ_F e energia ϵ.

c)- Seja $d(\epsilon) = \mathcal{D}(\epsilon)/N$ a densidade de estados em unidades de N, que deve ser expressa somente em termos da energia de Fermi ϵ_F e energia ϵ. Represente gráfica e esquematicamente, nos três casos, $d(\epsilon)$ em função da energia no intervalo $\epsilon \in [0, \epsilon_F]$, dando particular atenção aos valores de $d(\epsilon)$ e da sua derivada $d'(\epsilon) = \frac{\partial d(\epsilon)}{\partial \epsilon}$ em $\epsilon = 0$ e em $\epsilon = \epsilon_F$, respetivamente.