PGF5110 - Estado Sólido I

Lista de exercícios 1 - 2s/2018 (entrega em 10/09/2018)

1. Modelo de Drude - O modelo de Drude assume que os elétrons em metais se comportam como partículas clássicas (que obedecem às Leis de Newton) que sofrem colisões elásticas instantâneas. A hipótese central do modelo é que a probabilidade de o elétron sofrer uma colisão em um intervalo infinitesimal δt independende da história anterior do elétron e é dada simplesmente por $\delta t/\tau$ onde τ é o chamado *tempo de relaxação.* O tempo de relaxação é o único parâmetro livre.

Esta hipótese (que não é trivial) tem algumas consequências que vamos explorar a seguir.

(a) Considere um elétron escolhido aleatoriamente que sofreu uma colisão no instante $t = 0$. Mostre que a probabilidade deste elétron *não sofrer* colisões t segundos depois é $e^{-t/\tau}$.

Dica: lembre que a probabilidade de algo *não ocorrer* é $(1 - P_{\text{ocorrer}})$ e que $e^x = \lim_{n\to\infty}\left(1 + \frac{x}{n}\right)^n$.

(b) Mostre que uma consequência direta do resultado do item (a) é que o tempo médio entre duas colisões sofridas por um mesmo elétron ao longo da sua trajetória (média *temporal* para um elétron) é τ.

(c) Mostre (usando argumentos de probabilidade) que, para um elétron, a probabilidade de o intervalo de tempo entre duas colisões sucessivas estar entre t e $t + \delta t$ é $\frac{\delta t}{\tau} e^{-t/\tau}$

2. Modelo de Drude II Consideremos agora que os elétrons (massa m* e carga $-e$) estão sob a ação de um campo elétrico $\boldsymbol{E}$ e são descritos pelo modelo de Drude (tempo de relaxação τ). Se n é a densidade de elétrons por volume e $\langle \boldsymbol{v} \rangle$ é a velocidade média dos elétrons, a densidade de corrente será dada por $\boldsymbol{J} = -ne\langle \boldsymbol{v} \rangle$. A *condutividade elétrica* σ é definida pela relação $\boldsymbol{J} = \sigma \boldsymbol{E}$.

(a) Calcule a variação da velocidade média $\delta\langle \boldsymbol{v} \rangle$ dos elétrons que *não sofrem colisões* em um intervalo de tempo δt.

(b) Assumindo que a velocidade média dos elétrons que sofreram colisões entre t e $t + \delta t$ é zero, calcule $\langle \boldsymbol{v} \rangle(t + \delta t)$ (a velocidade média sobre todos os elétrons no instante $t + \delta t$) em termos de $\langle \boldsymbol{v} \rangle(t)$ e de outros parâmetros do modelo.

(c) Tomando o limite $\delta t \to 0$, mostre que:

$$\frac{d\langle \boldsymbol{v} \rangle}{dt} = -\frac{\langle \boldsymbol{v} \rangle(t)}{\tau} + \frac{(-e)\boldsymbol{E}}{m^*}$$

(d) Mostre que a solução estacionária leva a uma condutividade dada por $\sigma = \frac{ne^2\tau}{m^*}$.

3. Condutividade no modelo de Sommerfeld Mostre agora que o cálculo da condutividade pelo modelo de Sommerfeld também fornece *o mesmo valor* do modelo de Drude: $\sigma = \frac{ne^2\tau}{m^*}$.

(a) Use a aproximação de tempo de relaxação e mostre que o efeito de uma força $\boldsymbol{F}$ em cada elétron equivale a que o sistema adquira um momento $\hbar\boldsymbol{k}_0$ médio não-nulo dado por $\hbar\langle \boldsymbol{k}_0 \rangle_{\boldsymbol{k}} = \boldsymbol{F}\tau$ onde $\langle ... \rangle_{\boldsymbol{k}} = (2/N)\sum_{\boldsymbol{k}}(...)$ é uma média sobre os estados ocupados no modelo de Sommerfeld. Dica: lembre que $\boldsymbol{p} = \hbar\boldsymbol{k}$

(b) Mostre que isto leva a uma densidade de corrente na direção da força dada por $J = \frac{-ne\hbar}{m^*}\langle \boldsymbol{k}_0 \rangle_{\boldsymbol{k}}$

(c) Escrevendo $\boldsymbol{F} = -e\boldsymbol{E}$, calcule a condutividade no modelo de Sommerfeld.

4. Gás de elétrons em 2D Usando a densidade de estados do gás de elétrons em 2D (que você calculou na Tarefa 2), calcule as seguintes quantidades em função da temperatura T:

(a) O potencial químico $\mu(T)$. (Compare os termos até ordem T^2 com o caso 3D)

(b) A densidade de energia $u(T)$.

(c) A capacidade calorífica $C_v = \frac{\partial u}{\partial T}$. (Compare com o caso 3D). .

Para $\mu(T)$ e $u(T)$, apresente também as expansões até ordem $(k_BT/\varepsilon_F)^2$ onde ε_F é a energia de Fermi em 2D. Para $C_v(T)$, calcule o termo linear em T.

Dica: Escreva os resultados em termos de ε_F, o que simplifica as expressões.

5. Potencial periódico em 1D Considere o potencial $V(x) = V_0\cos^2\left(\frac{\pi x}{a}\right)$ em 1D.

(a) Mostre que o potencial tem a mesma periodicidade de uma rede linear de espaçamento a.

(b) Calcule os termos V_m da expansão de Fourier $V(x) = \sum_m V_m e^{iG_m x}$ onde $\boldsymbol{G}_m = m.\boldsymbol{A}$ é o vetor de deslocamento na rede linear recíproca gerada por $\boldsymbol{A}$ e m é um número inteiro.

6. Redes em 2D

(a) Mostre que a célula de Wigner-Seitz (primeira Zona de Brillouin, 1ZB) de uma rede quadrada é um quadrado e que, no caso geral de uma rede 2D, é um hexágono ou um retângulo.

(b) Definimos a 2a zona de Brillouin (2ZB) como o conjunto de pontos que estão mais próximos ao ponto da rede do que de seus segundos vizinhos mas que não pertencem à 1ZB (ou seja, estão mais próximos dos 1os vizinhos do que do ponto de referência). Mostre que a 2ZB de uma rede quadrada é formada por um conjunto desconexo de triângulos isósceles (se quiser, desenhe em um papel quadriculado para facilitar!).

Dica: Veja a Fig. 3.4(a) do livro.