Física do Estado Sólido

Problemas propostos

(2005-2006)

Actualizado em 29 de Maio de 2006

Aos alunos que entreguem regularmente ao professor a resolução dos problemas propostos não resolvidos nas aulas teóricas ou teórico-práticas será atribuída uma classificação até três quartos da componente de avaliação continua (ver: avaliação http://w3.ualg.pt/~jlongras/fes.html).

Nos exames é permitido o uso de uma página A4 com FORMULÁRIO DACTILOGRAFADO (tamanho de letra não inferior a 12) respeitando as regras SI da escrita de equações (ver, por exemplo, http://w3.ualg.pt/~jlongras/SI-escrita-de-equacoes.pdf ou http://w3.ualg.pt/~jlongras/SI.pdf). Este formulário deverá ser entregue ao docente juntamente com o exame. Não é permitido o uso de qualquer outro formulário nos exames.

http://w3.ualg.pt/~jlongras/fes.html.

Rede cristalina

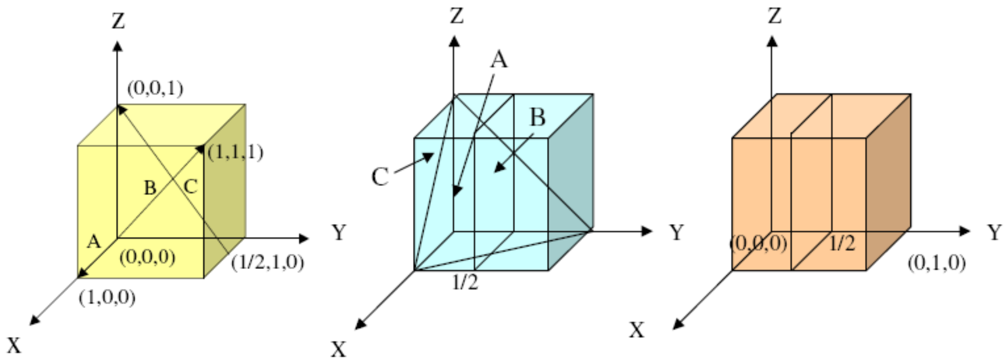
1. Calcule a relação que existe entre o parâmetro de rede a_o e o raio atómico para as estruturas cúbica simples (cs), cúbica de corpo centrado (ccc) e cúbica de faces centradas (cfc). (R: $a = 2r$, $a = 4r/\sqrt{2}$, $a = 4r/\sqrt{3}$)
2. Um cubo com uma mole de NaCl tem de lado 3 cm. Um cubo com uma mole de sódio tem 2,87 cm de lado. Determine as densidades do NaCl e do Na. (A massa atómica do Na é 23 gmol^{-1} e do Cl é 35,5 gmol^{-1}).
3. Quantos átomos existem num cubo de NaCl com um centímetro de lado? E num cubo de Na com a mesma dimensão?
4. Relacionar o volume por átomo com o parâmetro das redes cs, cfc e ccc.
5. Calcule o volume da célula primitiva de uma rede hexagonal com parâmetros de rede a e c.
6. Na estrutura hexagonal compacta $a = 2r$. Mostre que o valor ideal da relação c/a é 1,633. Compare o resultado com os valores para três metais da tabela apresentada na sebenta.
7. Determinar o número de pontos por célula unitária nas redes cristalinas cs, ccc, cfc e hcp. (R: 1, 2, 4, 6)
8. Determinar o número de pontos por unidade de volume nas redes cristalinas cs, ccc, cfc e hcp.
9. Qual é o número de coordenação nas redes cs, ccc, cfc e hcp? (6, 8, 12, 12)

10. Determinar a eficiência de ocupação da área pelos átomos nas redes bidimensionais: (a) quadrada e (b) triangular.
11. Calcule o factor de empacotamento/empilhamento atómico das estruturas cs, ccc e cfc, hcp. Considere os átomos como sendo esferas rígidas. (0,52, 0,68, 0,74, 0,74)
12. Calcule o factor de empacotamento/empilhamento atómico do diamante. (0,34)
13. Determine a densidade do Fe ccc com parâmetros de rede 286,6 pm. A massa atómica do Fe 55,85 g mol^{-1}. A densidade medida é 7,870 gcm^{-3}. Como explica a diferença?
14. Qual é a ordem de grandeza do número de átomos em 1 cm^3 dum metal?
15. Qual a distância mais curta entre dois átomos de Na no NaCl e no Na?
16. A densidade do Al é 2,70 gcm^{-3}. A massa atómica é 26,98 gmol^{-1}. Calcular o parâmetro da rede cfc do Al.
17. A densidade do Ni é 8,91 g cm^{-3}. A massa atómica é 58,71 gmol^{-1}. Calcular os parâmetros da rede cfc do Ni.
18. O ouro cristaliza na estrutura cfc e o átomo tem raio 144,2 pm. A massa atómica do ouro é 196.96654. Qual a densidade do ouro?
19. O preço de uma onça de ouro no mercado internacional ronda os 400 euros. Determine os preços do ouro por grama e por centímetro cúbico? Quanto custa uma célula unitária?
20. A platina cristaliza na estrutura cfc com raio atómico 138 pm. A massa atómica da platina é 195,08. Qual a densidade da platina?
21. A densidade do Fe-α é 7,87 gcm^{-3}. A massa atómica é 55,85 gmol^{-1}. Calcular o parâmetro da rede ccc do Fe-α.
22. A densidade do Cr é 7,19 gcm^{-3}. A massa atómica é 52,00 g mol^{-1}. Calcular o parâmetro da rede ccc do Cr.
23. A densidade do Mg é 1,741 gcm^{-3}. A massa atómica é 24,31 g mol^{-1}. Calcular o parâmetro da rede hcp do Mg.
24. Quais são as posições intersticiais de maior volume nas redes cfc e ccc ? Calcular o raio máximo dos átomos que podem ocupar estas posições.
25. Determine a factor de empacotamento do Silício cristalino. Calcule a densidade do Si.
26. Calcule a factor de empacotamento do GaAs cristalino. Determine a densidade do GaAs.
27. O raio atómico do Fe é 0,124 nm. Calcular o parâmetro da rede do Fe nas seguintes estruturas cristalinas (a) ccc e (b) cfc. ($2,86\times10^{-8}$ cm e $3,51\times10^{-8}$ cm)
28. Qual é a densidade do Fe na estrutura cristalina ccc cujo parâmetro de rede é 0,2866 nm?

29. Determine os vectores primitivos e as posições dos constituintes das bases das seguintes estruturas cristalinas: (a) CsCl, (b) NaCl e (c) diamante.
30. Qual é a célula primitiva Wigner-Seitz das redes cs, ccc e cfc?
31. Considere uma estrutura ccc. Qual a distância entre os primeiros, os segundos e terceiros vizinhos?
32. No NaCl o ião de sódio têm raio de 97 pm e o ião de cloro têm raio de 181 pm. a) Determine a aresta da célula convencional cúbica do NaCl. b) Qual é o factor de empacotamento do NaCl? c) Qual é a densidade do NaCl ? (0,556 nm, 0,667, 2,26 gcm^{-3})
33. O Fe é um material alotrópico (ou polimórfico) porque cristaliza nas estruturas cúbica de corpo centrado (ccc) e cúbica de faces centradas (cfc). Quando aquecido o Fe sobre uma mudança de fase de ccc para cfc. Os parâmetros da rede ccc e cfc na mudança de fase são, respectivamente 286,3 nm e 359,1 pm. Determine a variação do volume quando o Fe ccc sofre uma mudança de fase para a estrutura cristalina de faces centradas. (-1,34%)

Planos, direcções e coordenadas cristalográficas. Índices de Miller

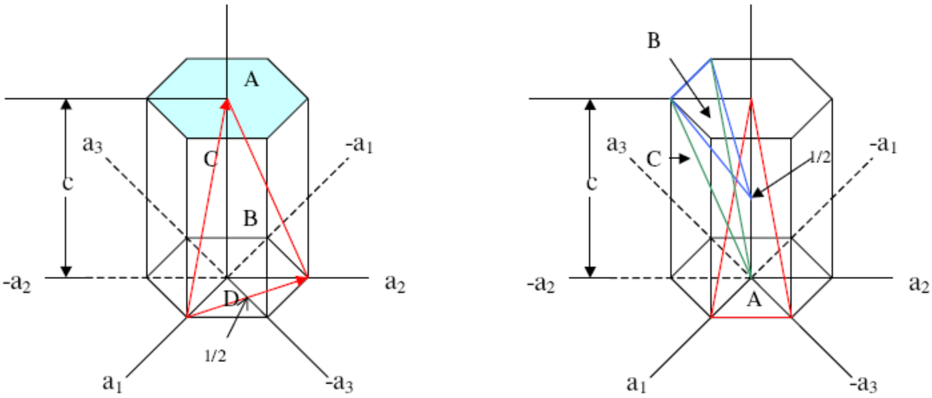
34. Mostre que numa rede de simetria cúbica a direcção [210] é perpendicular ao plano (210).
35. Considere uma estrutura ccc. Desenhe o plano $(2\bar{3}0)$. Desenhe a direcção $[4\bar{1}1]$.
36. Desenhe o plano (112) de uma célula cs. Determinar a área por átomo no referido plano.
37. Quantos átomos por mm^2 existem nos planos (100) e (111) do chumbo?
38. Quantos átomos por mm^2 existem nos planos (100) e (111) do Fe-α (que cristaliza na estrutura ccc)?
39. Para uma rede cs desenhe os planos com os índices de Miller: i) (001); ii) (110); iii) (111)
40. Sobre cada um dos planos do exercício anterior desenhe, respectivamente, as direcções: i) [210]; ii) [111]; iii) [101]
41. O cobre tem uma estrutura cfc e um raio atómico de 0,1278 nm. Quantos planos {100} existem (ao longo da espessura) de uma película de 1 μm de espessura; suponha que os planos (001) são paralelos às superfícies (superior e inferior) da película.
42. Listar por ordem decrescente de densidade atómica os seguintes planos: {100}, {110}, {210}, {111}, {211}, {311}, {221}.
43. Determine a direcção perpendicular ao plano (326), supondo que: a) pertence ao sistema cúbico; b) pertence a um sistema tetragonal, o qual é definido por $a=b\neq c$ e $\alpha=\beta=\gamma=90^o$.
44. Determine o ângulo θ entre as direcções [210] e [130] do sistema cúbico.
45. Certas direcções na célula unitária são particularmente importantes. Em geral, as propriedades de um material podem depender da direcção na qual esta propriedade é medida. Os metais, por exemplo, deformam-se, nas direcções ao longo das quais os átomos estão muito próximos uns dos outros. Determine as direcções A, B e C da Figura abaixo à esquerda.



46. Certos planos de átomos num cristal também são muito importantes. Por exemplo, os metais deformam-se ao longo do plano cujos átomos estão muito próximos uns dos outros. A

orientação dos planos cristalinos é especificada pelos índices de Miller (*hlm*). Determinar os índices de Miller dos planos das Figuras anteriores ao centro e à direita.

47. Determine os índices de Miller-Bravais para os planos A e B e para as direcções C e D na célula hexagonal (Figura abaixo à esquerda). Notação: os planos e as direcções na célula hexagonal compacta são caracterizados por quatro índices: (*hkil*) e [*hkil*], onde *i*= -(*h*+*k*).



48. Mostre que os planos (010) e (020) não são idênticos na célula unitária cs. (têm densidades planares diferentes: 0,79 e 0)
49. Determine os índices de Miller-Bravais dos planos indicados na Figura abaixo à direita.
50. Numa rede cúbica a direcção [*hkl*] é sempre perpendicular aos planos da família (*hkl*). Nem sempre isto ocorre para as células com outros tipos de estrutura cristalina. Considere uma célula unitária tetragonal com *a*=0,30 nm e *c*=0,50 nm. Verifique: (a) se a direcção [001] é perpendicular ao plano (001) e (b) se a direcção [101] é perpendicular ao plano (101).

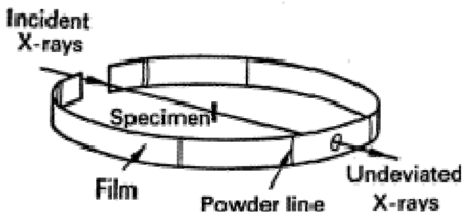
Difracção e Rede recíproca

51. Determine as redes recíprocas das redes directas cs, cfc e ccc.
52. Considere um plano (*hkl*) numa rede cristalina com vectores $\vec{a}$, $\vec{b}$ e $\vec{c}$. Mostre que o vector da rede recíproca $\vec{G}_{hkl}$ é perpendicular a esse plano.
53. Mostre que a distância entre dois planos adjacentes que passam por pontos da rede é $d_{hkl} = 2\pi\left|\vec{G}_{hkl}\right|^{-1}$.
54. Determinar a distância interplanar dos planos adjacentes (111) do ouro, cujo parâmetro de rede é 0,40786 nm.
55. Mostre que para uma rede cúbica simples $d_{hkl} = a\left(\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}\right)^{-1}$.
56. Determine os valores dos espaçamentos interplanares d_{200} e d_{111} no chumbo (que possui uma estrutura cfc, a_{Pb}=0,495 nm).
57. A grafite é um cristal de carbono constituído por planos atómicos fracamente ligados entre si. Em primeira aproximação pode ser considerada como um cristal bidimensional hexagonal. A distância entre átomos é 0,142 nm. Qual é a rede e a base do plano da grafite? Escreva os vectores de translação da rede e os vectores da base. Qual é a rede recíproca? Desenhe essa rede.
58. Que informação pode ser obtida a partir do padrão de difracção de raios X num cristal?
59. Um feixe de raios X com energia 59,32 keV incide numa amostra de ferro multi-cristalino. Os cristais de ferro têm uma estrutura ccc com parâmetro de rede 0,287 nm. Determine os quatro menores ângulos de difracção (2θ) observados nessas condições. [Os vectores primitivos que descrevem esta rede são $a(-\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2})$, $a(\frac{1}{2},-\frac{1}{2},\frac{1}{2})$ e $a(\frac{1}{2},\frac{1}{2},-\frac{1}{2})$].
60. Se a linha representa o plano (111) de que material é o cristal? (ouro)
61. Se uma película fotográfica sensível aos raios X for exposta a uma distância D=10 cm da amostra, qual vai ser o padrão de difracção formado. Determine as características do padrão (dimensões, raios, etc).
62. Considere a célula cúbica convencional, célula com vectores fundamentais (a,0,0), (0,a,0) e (0,0,a). Sabendo que os critérios para determinar a existência de difracção por parte de uma família de planos são:
    - Todos os índices são possíveis para a estrutura cúbica simples;
    - A soma dos índices ser um número par, para a estrutura cúbica de corpo centrado;
    - Os índices serem todos pares ou todos ímpares, para a estrutura cúbica de faces centradas;

Assinale (com um X) nas colunas da tabela correspondentes as reflexões possíveis para cada caso.

$N^2=h^2+k^2+l^2$	h	k	l	cs	cfc	ccc	Diamante
1	1	0	0				
2	1	1	0				
3	1	1	1				x
4	2	0	0				
5	2	1	0				
6	2	1	1				
7							
8	2	2	0				x
9	2	2	1				
9	3	3	0				
10	3	3	1				
11							x
12							
13							
14							
15							
16	4	0	0				x
17							
18							
18							
19							x
20							
21							
22	3	3	2				
22							
23							
24							x
25							
25							
26							
26							
27							x
27							x
28							
29							
29							

63. Se uma película fotográfica sensível aos raios X for exposta a uma distância D=10 cm da amostra, qual vai ser o padrão de difracção formado. Determine as características do padrão (dimensões, raios, etc).
64. Suponha que a radiação do Cromo de comprimento de onda 0,2291 nm produz uma linha difractada num filme para 2θ=58.2°. Qual é o espaçamento interplanar dos planos cristalográficos que produzem a linha difractada? (235,5 pm)
65. Uma rede ortorrômbica tem como vectores primitivos $a\vec{u}_x$, $b\vec{u}_y$, $c\vec{u}_z$: a) determine o conjunto de vectores primitivos para a rede recíproca. b) Encontre uma expressão para a distância entre os planos consecutivos da rede.
66. Suponha que um feixe de raios X de comprimento de onda λ=0,15418 nm incide na rede ortorrômbica cujos parâmetros de rede são a=0,133 nm e b=0,181 nm e c=0,362 nm . Determine os ângulos segundo os quais será possível observar reflexões associadas aos planos (100) e (101)?
67. A técnica de difracção de raios X de Dedye-Scherrer consiste de um filme que intercepta um cone de raios –X difractado por um espécime pulverizado (ver Figura abaixo). Num filme obtido através desta técnica, onde foi utilizada a radiação do ferro λ=0,1937 nm, a linha de difracção observada a 2θ=153.44° corresponde ao plano (310). Determine o parâmetro da rede do espécime.



68. Determine os ângulos que a radiação difractada pode fazer com a incidente, numa experiência de difracção de raios – X com comprimento de onda λ=0,104 Å, incidindo numa rede cúbica simples, com parâmetro a=0,40 nm.
69. Numa experiência de difracção, os raios – X com comprimento de onda λ=0,10 nm incidem sobre um cristal monoatómico com rede cúbica simples, o primeiro máximo de difracção faz com a direcção da radiação incidente um ângulo θ=16.4°. Determine o parâmetro a da rede cristalina.
70. Quais são as posições das linhas de difracção do espectro de difracção num cristal cúbico simples?

71. Determine o factor de estrutura de uma de uma rede cúbica de corpo centrado e de uma rede cúbica de faces centradas, associando a cada ponto da rede numa célula unitária convencional um factor de forma atómico.
72. Determine os factores de estrutura para as ligas metálicas AB e A_3B considerando uma distribuição aleatória dos dois tipos de átomo A e B nos pontos das redes cúbicas de Bravais.
73. Determine os factores de estrutura do ZnS, sabendo que as posições dos átomos na célula unitária são: Zn ($000, \frac{1}{2}\frac{1}{2}0,\ \frac{1}{2}0\frac{1}{2}, 0\frac{1}{2}\frac{1}{2}$) e S ($\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}, \frac{3}{4}\frac{3}{4}\frac{1}{4}, \frac{3}{4}\frac{1}{4}\frac{3}{4}\ \frac{3}{4}\frac{3}{4}\frac{1}{4}$). Interprete a diferença entre os espectros de raios – X das estruturas isomorfas do ZnS e do diamante.
74. Quais os valores $\sin^2\theta_{hkl}$ usados para descrever os espectros de raios – X dos cristais cúbicos?

Forças de Interacção. Ligação Cristalina.

75. A interacção num sólido molecular é descrita pela função: $U(R) = \frac{A_n}{R^n} - \frac{B_n}{R^m}$. a) Determine a separação de equilíbrio R_0; b) Verifique que $U(R)$ é estável se $n>m$; c) Qual a relação entre os termos atractivos e repulsivos para $U(R_0)$?

76. A energia total de dois átomos de árgon é dada por: $U(R) = B\left(\frac{a_0}{R}\right)^{12} - C\left(\frac{a_0}{R}\right)^{6}$, onde C=2,35 keV, B=169 MeV e a_0=52,918 pm é o raio de Bohr. O primeiro termo representa a energia da força atractiva devido aos electrões externos enquanto o segundo termo representa a energia de repulsão dos núcleos. Calcule: a) A separação de equilíbrio R_0; b) A energia de atracção para $R=R_0$; c) A energia de repulsão para $R=R_0$; d) A energia total para $R=R_0$.

77. Utilizando o potencial de Lennard-Jones, calcular a razão entre as energias de coesão do néon na estrutura cúbica de corpo centrado e na estrutura cúbica de faces centradas. Dados: $R^*_{eq}=1{,}09\sigma$. $\sum_j P_{ij}^{-12} = 12{,}13$ (cfc) e 9,11 (ccc), $\sum_j P_{ij}^{-6} = 14{,}45$ (cfc) e 12,25 (ccc).

78. A compressibilidade isotérmica k do árgon cristalino de estrutura cúbica de faces centradas, com parâmetro de rede a=0,531 nm, é $93{,}8\times10^{-11}$ m^{2}N^{-1}. Supondo que a interacção é do tipo forças de van der Waals, calcular R_0/σ e os valores dos parâmetros de energia σ e ε.

79. A energia total de um sólido iónico binário, onde a energia potencial é caracterizada por um par de iões, é dada por: $U(R) = N\left(\frac{\alpha q^2}{R} - \frac{A}{R^n}\right)$. Calcular: a) A separação de equilíbrio R_0; b) A compressibilidade isotérmica k $\left(B = k^{-1} = -V\left(\frac{\partial^2 U(V)}{\partial V^2}\right)_{V=V_0}\right.$, onde B representa o módulo de compressibilidade); c) Determine o parâmetro de energia n.

80. Para o cloreto de sódio, a baixa temperatura, a separação de equilíbrio é 0,279 nm e a compressibilidade isotérmica é $3{,}39\times10^{-11}$ m^{3}J^{-1}. Considere que a energia do NaCl é dada pela relação $U(R) = N\left(\frac{\alpha q^2}{R} - \frac{A}{R^n}\right)$. a) Calcule os parâmetros de energia n e A; b) Estime a contribuição da constante de Madelung α para a energia por célula unitária.

81. Calcule o trabalho de compressão W necessário para reduzir a separação de equilíbrio de uma cadeia linear de iões de R_0 para $R_0(1-\epsilon)$. A energia de uma cadeia linear é dada por $U(R) = NAq^2\left(\frac{\rho}{R_0^2}\exp\left[\frac{R-R_0}{\rho}\right] - \frac{1}{R}\right)$

82. Calcule o trabalho de compressão W reduzir a separação de equilíbrio R_0 para $R_0(1- \epsilon)$ numa cadeia linear iónica, considerando que a energia potencial para cada par de iões é dada por $U(R) = \left(\frac{B}{R^n} - \frac{Aq^2}{R} \right)$, com $B = Aq^2 R_0^{n-1} / n$.

83. Suponha que a energia de dois átomos de árgon de em função da distância é dada pelo modelo de Lennard-Jones $U(R) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{R} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{R} \right)^{6} \right]$, com os parâmetros $\varepsilon = 1{,}7\times10^{-21}$ J e $\sigma = 0{,}342$ nm.

a) Qual é a energia de coesão de uma "molécula" de Ar segundo este modelo? b) Qual é o comprimento da ligação? c) Assumindo a aproximação harmónica, qual é a frequência de vibração da molécula? ($F = C \cdot \Delta R$, $C = \left(\frac{d^2U(R)}{dR^2} \right)_{R_0}$, $\omega = \sqrt{\frac{2C}{m}}$, onde m representa a massa de um átomo de árgon.)

Vibrações da rede cristalina e propriedades térmicas da rede.

84. Considere um sistema unidimensional de quatro átomos iguais de massa m, onde os átomos situados nas extremidades da cadeia estão em repouso. Na aproximação elástica: a) determine a força sobre cada um dos átomos e escreva as equações de movimento de cada átomo; b) calcule as frequências próprias do sistema.

85. Mostre que a relação de dispersão para uma cadeia linear infinita de átomo idênticos, considerando apenas a interacção entre vizinhos mais próximos, é $\omega = 2a\sqrt{\frac{C}{M}}\left|\sin\frac{ka}{2}\right|$, onde a é a separação entre átomos, C é o parâmetro de força e M é a massa do átomo.

86. A baixa frequência a velocidade do som em muitos sólidos é da ordem de 10^3 m/s, diferindo deste valor em cerca de 1% para frequências até 10^{11} Hz. Considerando um espaçamento típico entre átomos da ordem de 0,2 nm, faça uma estimativa da frequência angular máxima possível de uma onda progressiva nestes sólidos.

87. Mostre que para o regime de grandes comprimentos de onda, a relação de dispersão de uma cadeia linear diatómica pode ser aproximada por: a) $\omega = \sqrt{2C\left(\frac{m+M}{mM} - \frac{1}{4}\frac{1}{m+M}(ka)^2\right)}$ para os modos ópticos; b) $\omega = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{2C}{m+M}}|ka|$ para os modos acústicos.

88. Num cristal unidimensional monoatómico quando o comprimento de onda das oscilações é 100 vezes a distância inter-atómica a velocidade de fase é 4×10^5 cm/s. Quais os valores da velocidade de fase e da velocidade de grupo quando $k = \pi/a$? ($2,55\times10^5$ cm/s e 0 cm/s)

89. Um modelo para o estudo das vibrações de uma cadeia de polietileno[1] -CH=CH-CH=CH- consiste em considerar uma cadeia linear de massas idênticas M e parâmetro de força que alternam entre os valores C_1 e C_2. Mostre que as frequências características de uma tal cadeia são dadas por: $\omega^2 = \frac{C_1+C_2}{M}\left[1 \pm \sqrt{1 - 4\frac{C_1C_2\sin^2(ka/2)}{(C_1+C_2)^2}}\right]$, em que a é o parâmetro da rede. Faça o estudo das situações limite $k \to 0$ e $k \to \pm\pi/a$, e esboce a relação de dispersão.

90. Faça uma estimativa da energia térmica necessária para que a temperatura de 1 kg de NaCl passe de 20 ^{0}C para 80 ^{0}C. Considere que 1 kWh custa 0,09 euros, quanto gasta para aumentar a temperatura dessa massa de 20 ^{0}C para 80 ^{0}C, por efeito de Joule. As massas atómicas do Na e do Cl são respectivamente 23 u e 35,5 u. (853 J/K; 0,00128 euros)

[1] Polietileno: (quím.) plástico obtido por polimerização do etileno, empregado como isolador eléctrico e no fabrico de tubos e outros objectos.

91. Os modos ópticos são razoavelmente descritos pelo modelo de Einstein. Porquê? E para os modos acústicos que modelo deveríamos usar? Justifique.
92. A energia típica dos fonões dos modos ópticos, E_{fo}, no GaAs é, aproximadamente, 250 cm^{-1}. Numa primeira aproximação, a temperatura de Einstein pode ser estimada usando a igualdade $E_{fo}=k_B\Theta_E$. Faça uma estimativa simples, mas justificada, da capacidade térmica de 1 cm^3 de GaAs a 1500 K. A densidade do GaAs é 5,32 g cm^3 e as massas atómicas do Ga e As são respectivamente 69,72 u e 74,92 u. (1,82 J/K)
93. Utilize o modelo de Debye para calcular a velocidade do som v_0, a densidade de fonões $D(\omega)$ e a capacidade calorífica de uma rede monoatómica unidimensional de comprimento L, para temperaturas muito inferiores à temperatura de Debye $\theta_D = \frac{\hbar\pi v_0}{k_B a}$, onde a é o parâmetro da rede. As constantes numéricas na forma de integrais não precisam ser calculadas. $\left(\text{Considere } \omega = 2a\sqrt{\frac{C}{M}}\left|\sin\frac{ka}{2}\right|.\right)$
94. O que aconteceria à capacidade calorífica dos sólidos à temperatura ambiente se a constante de Planck tivesse um valor 10 vezes superior?
95. Mostre que a capacidade calorífica de uma rede linear monoatómica na aproximação de Debye é proporcional a (T/θ_D) para $T << \theta_D$.
96. Determine a capacidade calorífica de uma rede linear monoatómica quando $T \to \infty$.
97. Se em duas dimensões a densidade de estados entre k e $k+dk$ é $kdk/(2\pi)$ mostre que a capacidade calorífica para um sólido bidimensional nos limites $T \to 0$ e $T \to \infty$ é proporcional, respectivamente, ao quadrado da temperatura e a $2R$/mol.

Modelos dos electrões livres e gás de Fermi nos sólidos.

98. Considere um gás de electrões livres a muito baixa temperatura. Usando a condição fronteira de barreira de potencial infinita, determine: a) Demonstre que a densidade de estados é $D(E_F)=\frac{3}{2}\frac{N}{E_F}$; b) Mostre que a energia total do gás é dada por $U=\frac{3}{5}NE_F$; c) Prove que o módulo de compressibilidade é dado por $B=\frac{2}{3}N\frac{E_F}{V}$.

99. Sabendo que o ouro cristaliza numa estrutura cfc, com parâmetro de rede *a*=0,408 nm, e que a energia de Fermi, a muito baixa temperatura, é cerca de 5 eV, calcule o módulo de compressibilidade do ouro.

100. Mostre que para um gás de Fermi de electrões livres confinados numa amostra cúbica de lado *L*: a) O número de electrões livres por unidade de volume, *n*, com energia menor ou igual a ε é $n=\frac{1}{3\pi^2}\left(\frac{2m_e\varepsilon}{\hbar^2}\right)^{3/2}$, com $\varepsilon(k)=\frac{\hbar^2}{2m_e}k^2$, onde *k* é o módulo do vector de onda; b) A densidade de estados electrónicos é $D(\varepsilon)=\frac{3N_{\leq\varepsilon}}{2\varepsilon}$, onde $N_{\leq\varepsilon}$ representa o número total de electrões livres na amostra com energia menor ou igual a ε.

101. Discuta a dependência na temperatura da capacidade calorífica de um sólido dieléctrico (contribuição electrónica + contribuição da rede).

102. Indique as principais dificuldades da teoria clássica na explicação das propriedades dos metais.

103. O ouro cristaliza numa estrutura cúbica de face centradas com parâmetro de rede *a*=0,408 nm e tem massa atómica 194 u: a) Derive o resultado de Drude-Lorentz para a condutividade eléctrica de um metal: $\sigma=ne^2\tau/m_e$; b) A 300 K, a resistividade do ouro é $2{,}2\times10^{-6}$ 'Ωcm. c) Calcule o tempo médio entre colisões e o livre percurso médio dos electrões a esta temperatura, de acordo com o modelo de Drude-Lorentz;

104. Indique as principais dificuldades da teoria de Drude-Lorentz na explicação das propriedades dos metais. Mostre que, segundo a teoria quântica, a condutividade eléctrica de um metal é $\sigma=ne^2\tau/m_e$.

105. Indique as principais dificuldades da teoria clássica na explicação do comportamento de determinadas propriedades do gás de electrões dos metais.

106. Considere uma amostra de 0,5 cm^{-3} de magnésio. Suponha que pode aplicar o modelo de electrões livres ao magnésio. O magnésio cristaliza na estrutura hcp com dois electrões de valência por átomo, e os parâmetros de rede *a*=0,321 nm e *c*=0,521 nm. O magnésio tem uma

resistividade de $4{,}3\times10^{-8}$ Ωcm (à temperatura ambiente). a) Qual é o vector de onda de Fermi? ($1{,}365\times10^{10}$ m^{-1}); b) Qual é a energia de Fermi em eV? (7,1 eV); c) Qual a densidade de estados com energia de Fermi e o número total de electrões? ($9{,}08\times10^{21}$ eV^{-1}; $0{,}41\times10^{23}$); d) Qual é o coeficiente de Hall que esperaria observar? ($-0{,}73\times10^{-10}$ m^{3}C^{-1}); e) Qual é o livre percurso médio dos electrões, à temperatura ambiente? (150×10^{-10} m)

107. Um metal tem um coeficiente de Hall -4×10^{-11} m^{3}C^{-1} e uma condutividade $1{,}72\times10^{3}$ Ω^{-1}m^{-1}. Qual é o tempo de relaxação para os electrões? Comente o resultado. (4×10^{-19} s; o valor "experimental" $\sim1\times10^{-14}$ s)

108. A baixa temperatura a capacidade calorífica devida aos electrões é linear com a temperatura, $C_{V,el} = Nk_B \frac{\pi^2}{2}\frac{T}{T_F}$, enquanto que a capacidade calorífica associada às vibrações da rede é proporcional ao cubo da temperatura, $C_{V,red} = 3Nk_B \frac{4\pi^4}{5}\left(\frac{T}{T_D}\right)^3$, segundo o modelo de Debye. Qual é a temperatura T_0 para a qual a contribuição do gás de electrões livres iguala a da vibração da rede na aproximação de baixa temperatura? Assumindo $T_D \sim 300$ K e $T_F \sim 30\,000$ K, faça uma estimativa para T_0. ($T_0 = \sqrt{\frac{5}{24}\frac{1}{\pi}} T_D \sqrt{\frac{T_D}{T_F}} \sim 5$ K)

109. Considere um gás de electrões livres a duas dimensões num rectângulo de lados L_x e L_y, e com condições fronteira do tipo barreira infinita, ou seja $\varphi(0,y)=\varphi(L_x,y)=\varphi(x,0)=\varphi(x,L_y)=0$. a) Calcule o vector de onda de Fermi e a energia de Fermi; b) Determine a energia do sistema para baixas temperaturas; c) Determine a capacidade calorífica deste "gás de electrões bidimensional" a baixa temperatura.

Considere $\int_0^\infty \frac{\varepsilon}{\exp\left(\frac{\varepsilon-E_F}{k_BT}\right)+1}d\varepsilon = -k_B^2T^2\mathrm{Li}_2\left(-\exp\left[\frac{E_F}{k_BT}\right]\right)$, com $\mathrm{Li}_2\left(-\exp\left[\frac{E_F}{k_BT}\right]\right) \xrightarrow[T\to0]{} -\frac{1}{2}\frac{E_F^2}{k_B^2T^2}-\frac{\pi^2}{6}$.[2]

110. Calcule a compressibilidade e o modulado de compressibilidade do gás de electrões livres a baixa temperatura usando: a) a condição fronteira infinita e b) a condição fronteira periódica.

Nos exames é permitido o uso de uma página A4 com FORMULÁRIO DACTILOGRAFADO (tamanho de letra não inferior a 12) respeitando as regras SI da escrita de equações (ver, por exemplo, http://w3.ualg.pt/~jlongras/SI-escrita-de-equacoes.pdf ou http://w3.ualg.pt/~jlongras/SI.pdf). Este formulário deverá ser entregue ao docente juntamente com o exame. Não é permitido o uso de qualquer outro formulário nos exames.

http://w3.ualg.pt/~jlongras/fes.htm
29 de Maio de 2006.

[2] $\mathrm{Li}_2(x)$ corresponde à função polilogaritmo de 2 (ver http://mathworld.wolfram.com/Polylogarithm.html).