

Lista de Exercício #3. Parte 1 (Baseada no M. Fox)

1. Mostre que se os campos elétrico e magnético  $\mathbf{E}$  e  $\mathbf{B}$  da onda de luz variam ambos como a parte real de  $e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}$ , com  $\omega = ck$ , e  $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$  (A.14),  $\mathbf{E} = -\partial\mathbf{A}/\partial t$  (A.18),  $\mathbf{A}$  também varia da mesma maneira.
2. Mostre que  $\mathbf{E}_o = -i\omega\mathbf{A}_o$ . Dica: use as eqs.B.21 e A.18.
3. (a) Defina os coeficientes de Einstein e explique seu significado. (b) Escreva as relações entre os coeficientes de Einstein.
4. Enuncie a 2ª regra de ouro de Fermi e explicito o significado de cada termo.
5. (a) Enuncie as regras de seleção para transições em átomos de um único elétron. (b) Explique a razão para cada uma das regras de seleção do item (a).
6. Explique o significado de rede recíproca.
7. Encontre os vetores da rede recíproca da rede real gerada pelos vetores:

$$\vec{a}_1 = a \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \vec{a}_2 = b \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \vec{a}_3 = c \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

8. (a) Mostre que a rede recíproca de uma rede cúbica simples também é cúbica simples. (b) Mostre que o volume da célula de Wigner-Seitz de uma célula cúbica de parâmetro de rede  $\alpha$  é  $\alpha^3$  (c) Mostre que o volume da primeira zona de Brillouin de uma rede cúbica simples, cujo parâmetro de rede no espaço direto é  $\alpha$ , é  $\left(\frac{2\pi}{\alpha}\right)^3$ .
9. (a) Mostre que a rede recíproca de uma rede cúbica de face centrada (do inglês Face Centered Cubic = FCC) é uma rede cúbica de corpo centrado (do inglês Body Centered Cubic = BCC).
10. Dadas duas curvas de dispersão de energia de elétrons no espaço recíproco:  $E_{\vec{k}}^o$  e  $E_{\vec{k}+\vec{K}}^o$ , em regiões nas quais a separação entre elas seja menor que  $|V|$ , ou seja, sendo próximas entre si essas curvas:  $|E_{\vec{k}}^o - E_{\vec{k}+\vec{K}}^o| \leq V$  e distantes das demais:  $|E_{\vec{k}}^o - E_{\vec{k}+\vec{K}'}^o| \gg V$ , para todos os outros  $\vec{K}' \neq \vec{K}$ , mostre que:
  - (a)

$$(E - E_{\vec{k}}^o)c_{\vec{k}} = V_{\vec{K}}c_{\vec{k}-\vec{K}} \quad e \quad \text{E.1}$$

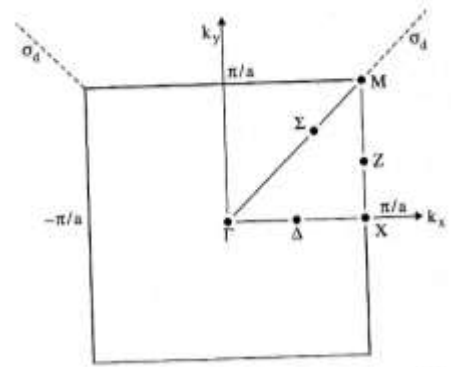
$$(E - E_{\vec{k}+\vec{K}}^o)c_{\vec{k}-\vec{K}} = V_{-\vec{K}}c_{\vec{k}} \quad \text{E.2}$$

onde  $V_{\vec{K}}$  são os coeficientes de Fourier da expansão da energia potencial:  $V(\vec{r}) = \sum_{\vec{K}} V_{\vec{K}} e^{i\vec{K}\cdot\vec{r}}$ , e  $c_{\vec{k}}$  são os coeficientes de Fourier da expansão de função de onda, sujeita a condições de contorno periódicas (condição de Born e von-Karman):  $\psi(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} c_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$

(b) para as mesmas condições do item (a) mostre que a dispersão dos autovalores de energia é dada por:

$$E = \frac{1}{2}(E_{\vec{k}}^o + E_{\vec{k}+\vec{K}}^o) \pm \sqrt{\left(\frac{E_{\vec{k}}^o - E_{\vec{k}+\vec{K}}^o}{2}\right)^2 + |V_{\vec{K}}|^2} \approx \frac{1}{2}(E_{\vec{k}}^o + E_{\vec{k}+\vec{K}}^o) \pm |V_{\vec{K}}|$$

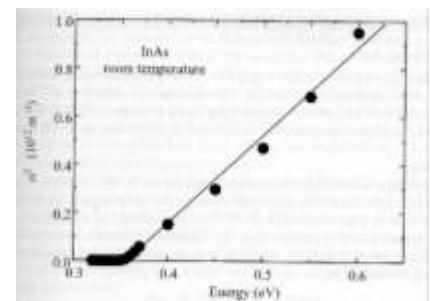
11. A figura mostra a vista superior da 1ª zona de Brillouin de uma rede quadrada, cujo parâmetro de rede é  $a$ , com alguns pontos de alta simetria. Faça um gráfico contendo as energias das bandas de elétron livre



$$E = \frac{\hbar^2}{2m_e} (\vec{k} - \vec{G})^2$$

ao longo do caminho  $\Gamma$ -M-X- $\Gamma$ . Limite os valores de  $E$  a um máximo de  $10\hbar^2/(8m_e a^2)$ . Você necessitará considerar curvas de dispersão originadas em zonas de Brillouin vizinhas próximas. Você verá que as curvas de dispersão irão se cruzar em pontos de alta simetria. Indique a degenerescência, ou seja o número de curvas que convergem em tais pontos do seu diagrama.

12. Faça um diagrama esquemático de arranjo experimental que pode ser usado para obter os dados de absorção mostrados na figura ao lado (M.Fox, Fig.3.6)
13. Explique como você pode utilizar as medidas ópticas para determinar se um semiconductor tem bandgap direto ou indireto.



14. Mostre que a densidade de estados para um elétron com:  $E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$  é dada por:

$$g(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2}\right)^{3/2} \cdot E^{1/2}$$

15. Na folha em anexo existe um molde para você montar um sólido que representa a primeira zona de Brillouin (ZB) de uma rede FCC (a rede direta é uma FCC, e a rede recíproca é uma BCC). A primeira ZB da FCC é a célula de Wigner-Seitz da BCC. Recorte nas linhas sólidas, deixando pequenas abas nos quadrados, e dobre nas tracejadas para montar o sólido.

