6.1 A figura mostra o resultado experimental do calor específico do Si a baixa temperatura para a composição isotópica natural e para amostras formadas quase que por um só tipo de isótopo.

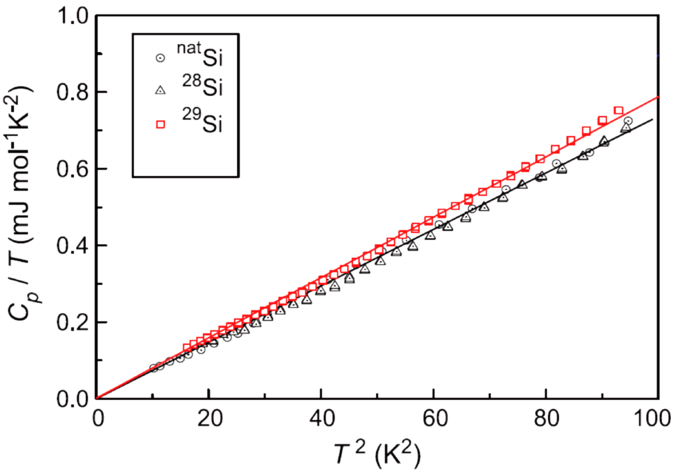

Fig. 1. Heat capacity of natural and isotopically enriched Si in the temperature range 4 K < T < 10 K. We have used the standard plot of C_p/T vs. T^2.

A baixa temperatura o calor específico do Si é bem descrito pelo modelo de Debye,

$$C = Nk_\mathrm{B}\frac{12\pi^4}{5}\frac{T^3}{T^3_\mathrm{Debye}},$$

onde $T_\mathrm{Debye} = \hbar\omega_\mathrm{Debye}/k_\mathrm{B}$ é a temperatura de Debye.

a) Explique porque é que o calor específico é maior para os isótopos mais pesados.

b) Qual é a dependência de $C_v(^{29}\mathrm{Si})/C_v(^{28}\mathrm{Si})$ na massa dos isótopos. Diga se é compatível com a figura.

c) Obtenha da figura o valor da temperatura de Debye do Si.

Temos que a baixas temperaturas $C_v \simeq 234Nk_B\left(\frac{T}{T_D}\right)^3$. Para uma mole temos que $c_v = 1945\ \mathrm{J\,mol^{-1}\,K^{-1}}\left(\frac{T}{T_D}\right)^3$. Lendo no gráfico temos que para 10 K $c_p \simeq c_v \simeq 7\times10^{-3}\ \mathrm{J\,mol^{-1}\,K^{-1}}$ pelo que $\left(\frac{T_D}{10\ \mathrm{K}}\right)^3 \simeq 2.8\times10^5$ e $T_D \simeq 650$ K. O valor normalmente usado (vulgo Wikipedia) é $T_D \simeq 645$ K.

6.2 Considere ondas acústicas num cubo de dimensões $L\times L\times L$, e com condições de barreira infinita na fronteira, ou seja $u(0,x,y) = U(L,x,y) = 0$, etc.

a) Mostre que se obtêm vectores de onda que não existem com condições de fronteira periódicas.

b) Calcule a densidade de estados no modelo de Debye para estas condições de fronteira. Qual é o calor específico previsto?

6.3 Considere um sólido num universo a 2 dimensões. Qual seria a dependência na temperatura do calor específico a baixas temperaturas? Qual seria o calor específico a altas temperaturas?

6.4 Os modelos de Einstein e Debye têm ambos o mesmo comportamento assimptótico a alta temperatura

$$C \simeq 3R(1 - \frac{b}{T^2}) + \dots$$

a) Calcule b para o modelo de Einstein. Use este resultado

$$\frac{e^x}{(e^x - 1)^2} = \frac{1}{x^2} - \frac{1}{12} + \frac{x^2}{240} - \frac{x^4}{6048} + \dots$$

b) Calcule b para o modelo de Debye. Determine uma razão aproximada para $T_{\mathrm{E}}/T_{\mathrm{D}}$.

Problema numérico para fazer em casa

6.5 Este problema de um electrão num poço de potencial serve para preparar os futuros problemas de electrões num potencial periódico.

Considere uma partícula de massa m_e num poço de potencial a uma dimensão,

$$V_{\mathrm{at}}(x) = \begin{cases} 0 & \text{se } |x| > \frac{1}{2}\pi\sigma \\ C\frac{\hbar^2}{m_e\sigma^2}\left(\sin^4(x/\sigma) - 1\right) & \text{se } |x| < \frac{1}{2}\pi\sigma \end{cases}$$

com $\sigma = 1.058 \times 10^{-10}$ m e $C = 3 + b/100$, onde b são os 2 últimos algarismos do seu número mecanográfico.

Na página da cadeira encontra um "notebook" do "Mathematica" que o pode ajudar na parte numérica.

a) Faça uma estimativa grosseira dos valores próprios dos estados ligados deste potencial a partir de um poço de potencial de barreira infinita com largura $\pi\sigma$.

b) Use análise dimensional e escreva a equação de Schrödinger de forma adimensional.

c) Obtenha numericamente com uma precisão de $0.001\frac{\hbar^2}{m_e\sigma^2}$ os valores próprios dos estados ligados de $V_{\mathrm{at}}(x)$. Não se esqueça de mudar as condições de fronteira em $x = 0$ para ter os estados simétricos e antisimétricos.