

9.1 Calcule a pressão do gás de electrões livres a baixas temperaturas.

9.2 Considere o vector de onda $\vec{k} = \frac{2\pi}{a}(1, \frac{1}{2}, 0)$ para um cristal fcc com constante de rede a .

- Mostre que esse vector de onda está no plano de Bragg associado ao vector $\vec{G}_1 = \frac{2\pi}{a}(2, 0, 0)$.
- Mostre que esse vector está em mais dois outros planos de Bragg, e identifique os respectivos vectores.
- Suponha que o potencial é fraco e escreva a matriz que deve diagonalizar usando o “espaço de Hilbert restrito” de ondas planas de menor dimensão que seja apropriado para este problema.
- Obtenha a energia desses estados em função de $\tilde{V}(\vec{G})$.

9.3 Considere o potencial periódico $V(x) = 2U \sin(x/\sigma)^2$ com $\sigma = 1.058 \times 10^{-10}$ m e $U = \hbar^2/m_e\sigma^2$.

- Escreva a equação de Schrödinger adimensional para este problema.
- Encontre a série de Fourier de $V(x)$.
- Para os vectores de onda $k = 0$ e $k = 1$ nas unidades adimensionais do problema resolva a equação de Schrödinger usando “espaços de Hilbert restritos” numa base de ondas planas. Comece com dimensões as mínimas e depois vá aumentando o tamanho da base.

Problema numérico para fazer em casa

9.4 Considere uma partícula de massa m_e no mesmo potencial da prática anterior,

$$V(x) = C \frac{\hbar^2}{m_e \sigma^2} (\sin^4(x/\sigma) - 1)$$

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.

- a) Determine a série de Fourier do potencial e escreva a estrutura geral do hamiltoniano reduzido para um vector de onda k_{Bloch} numa base de ondas planas.
- b) Calcule as energias das 3 primeiras bandas para $k = 0\frac{1}{\sigma}$, $k = \frac{1}{2}\frac{1}{\sigma}$ e $k = 1\frac{1}{\sigma}$.
- c) Desenhe as 3 primeiras bandas e compare com o problema anterior.