Lista de Exercícios II

1. (problema 2.6, Ibach Luth, 2a. ed.) Determine a razão entre as constantes c e a da estrutura hexagonal compacta (hcp) na sua forma mais compactada e compare com os valores de c/a encontrado nos seguintes elementos, todos cristalizando-se na hcp: He (c/a=1,633), Mg (1,623), Ti (1,586), Zn (1,861). Qual seria a explicação para o desvio em relação ao valor ideal?

2. (problema 2.7, Ibach Luth, 2a. ed.) Suponha que os átomos seja esferas rígidas, qual a fração do espaço é preenchida pelos átomos nas redes primiticas cúbica simples, fcc, hcp, bcc e do diamante?

3. (problema 3.2, Mader) Prove que a rede recíproca de uma rede hexagonal definida pelos vetores (a,0,0), (a/2, a$\sqrt{3}$/2,0) e (0,0,c) é outra rede hexagonal girade de 30° em relação a rede original. encontre os vetores primitivos para a rede recíproca.

4. (problema 3.1, Ibach Luth, 2a. ed.) (a) Mostre que a rede recíproca da rede recíproca é a rede original do espaço real.
   (b) Seja $f(\vec{r})$ uma função periódica na rede. Mostre que os vetores $\vec{k}$ que aparecem na série de Fourier $f(\vec{r}) = \sum_a f_a \exp(-i\vec{G}_{hkl} \cdot \vec{r}_a)$ são os vetores da rede recíproca $\vec{G}$.

5. Calcule o fator de estrutura $S_{hkl} = \sum_a f_a \exp(-i\vec{G}_{hkl} \cdot \vec{r}_a)$ para uma rede fcc. Compare as extinções previstas e as intensidades dos picos de difração com o resultado experimental abaixo.

6. (Problema 3.6, Ibach Luth, 2a. ed.) Considere o elemento de matriz para a absorção de um foton de raios X por um átomo, $\langle i|x|f\rangle$, onde $< i|$ é o estado inicial localizado do elétron no átomo e $|f >$ é o estado final tipo onda-s e^{ikr}/r onde $\hbar^2k^2/2m = \hbar\omega - E_I$, onde E_I é a energia

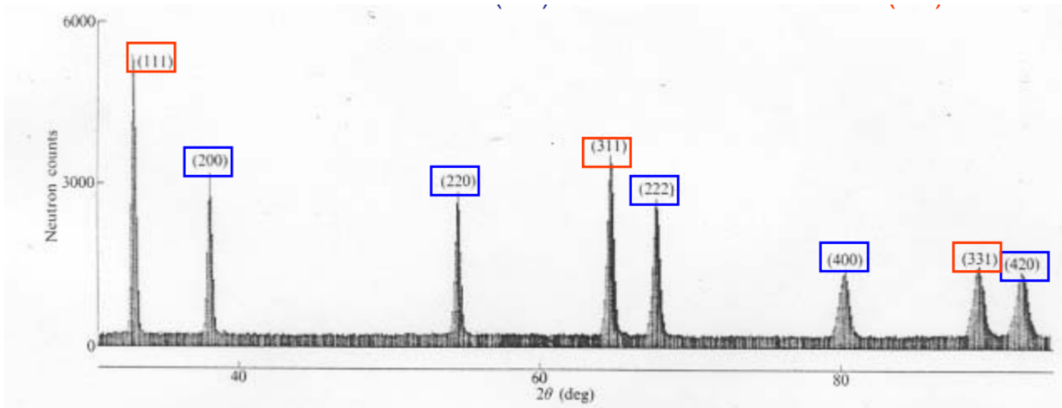

FIG. 58. A section of a powder diffraction pattern for nickel at a wavelength of 1·14 Å recorded on the PANDA diffractometer at A.E.R.E.-Harwell using a germanium monochromator. Counts are made at intervals of 0·1° of 2θ. (Courtesy of R. F. Dyer.)

Figure 1: Padrão de difração do Ni (estrutura fcc). (Extraído de Chris Wiebe - National High Magnetic Field Laboratory)

do limiar de ionização. Assuma agora que o átomo é envolto por uma camada de átomos primeiros vizinhos que espalham a onda emitida. O estado final consiste da onda emitida mais as ondas esféricas espalhadas pelo conjunto de átomos primeiros vizinhos. O que você espera para a absorção de raios X acima do limiar? Descreva um método para determinar as distâncias dos primeiros vizinhos de um material amorfo a partir das oscilações do coeficiente de absorção de raios X acima do limiar (***E****xtended* ***X****-ray* ***A****bsorption* ***F****ine* ***S****tructure*: EXAFS). Qual o tipo de fonte de luz necessário para o experimento? Por quê? Por quê o método necessita estudar a estrutura oscilatória das energias dos fótons consideravelmente acima do limiar? Qual é a dificuldade experimental para determinar a vizinhança de um átomo de carbon em uma matriz amorfa?

7. (Problema 3.7, Ibach Luth, 2a. ed.) Considere o espalhamento de um conjundo desordenado de N átomos com amplitudes de espalhamento f.

(a) Mostre que a intensidade de espalhamento $I(\vec{K})$ pode ser escrita na forma

$$I(\vec{K}) \propto f^2 \left[N + \sum_{i,j,i\neq j} e^{-i\vec{k}\cdot(\vec{r}_i - \vec{r}_j)} \right]$$

(b) Considere $dP = n^2 g(1,2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2$ a probabilidade de encontrar o átomo 2 em $d\vec{r}_2$ quando o átomo 1 está em $d\vec{r}_1$, onde n é a densidade atômica. Mostre que para um sistema homogêneo a intensidade de espalhamento é

$$I(\vec{K}) \propto f^2 N \left[1 + n \int g(r) e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} d\vec{r} \right]$$

Para distâncias grandes $\vec{r}_i$ de qualquer ponto arbitrário, $g(\vec{r}_i)$ é igual a um. Para $g(\vec{r}_i) = 1$, caso de um material completamente homogêneo, o segundo termo torna-se uma função delta em $\vec{K}$. Definimos então um *fator de estrutura de líquido.*

8. Calcule a intensidade de espalhamento para o espalhamento de Thomson (consulte um livro de eletromagnetismo). Mostre que ela é proporcional a $1/m^2$.

9. (problema 3.10, Ibach Luth 2a. ed.) O espalhamento elástico para uma rede cristalina periódica infinita resulta em picos de reflexão de Bragg infinitamente estreitos. Discuta, com base na representação de transformada de Fourier da intensidade de espalhamento, $I(\vec{k}) \propto |\sum_{\vec{G}} \rho(\vec{G}) \int e^{i(\vec{G}-\vec{k})\cdot\vec{r}} d\vec{r}$, a difração para pequenos cristais de tamanho finito. Como você pode estimar o tamanho médio dos cristais do padrão de difração? Verifique para o caso unidimensional.

10. *(problema 3.5, Mader) (a) Assuma que todos os fatores de forma iônicos f_l na equação $I = \sum_{l,l'} f_l f_{l'}^* e^{i\vec{q}\cdot(\vec{R}_l - \vec{R}_{l'})}$ são reais. Mostre que os

dados do espalhamento de raios X farão com que todos os cristais assemelhem-se a cristais centro-simétricos, mesmo quando não for o caso (*lei de Friedel*).

(b) Considere que um cristal que não é centro-simétrico e com dois átomos diferentes por célula unitária. Assuma que a frequência de raios X é escolhida próxima de um valor ω_0 para o qual os átomos tenham uma ressonância de absorção. Assuma que a dependência da absorção com a frequência possa ser modelada com o átomo comportando-se como uma massa e uma mola com um fator de amortecimento. Mostre que a amplitude e a fase da radiação espalhada varia exatamente como a amplitude e a fase da massa com a mola com amortecimento na presença de uma força restauradora periódica. Mostre que as fases dos dois fatores de forma f para os dois átomos são diferentes e que a intensidade de espalhamento contém agora a informação que permite deduzir se o cristal é ou não centro-simétrico.