Lista de Exercícios III

1. (baseado no problema 2, cap. 2, Ibach&Luth, 3a. ed.) Abaixo de 910 °C o ferro existe na estrutura bcc (α-Fe). Entre 910 °C e 1390 °C ele assume a estrutura fcc (γ-Fe). Assumindo átomos esféricos, determine a forma e tamanho dos sítios intersticiais octaédricos no γ-Fe ($a = 3,64$Å) e no $\alpha-$Fe ($a = 2,87$Å). Esquematize as redes e os sítios intersticiais. Para qual fase você espera maior solubilidade do carbono? (o raio covalente do carbono é $0,77$Å).

2. Considere que um cristal líquido na sua fase esmática-A tem uma correlação de posição descrita por uma modulação sinusoidaldo número de densidade molecular média, $|\langle n_{q0}\rangle|^2 = n_0 + 2n_{q0}\cos(q_0 z)$, (e não quadrada, como descrito nas notas, por simplificação). Mostre que o fator de estrutura, $S(\vec{q})$, possuidois picos de Bragg fora do ponto $\vec{q} = 0$. O que aconteceria se o número de densidade molecular média apresentasse uma modulação quadrada?

3. (baseado no problema 3, cap. 2, Ibach&Luth, 3a. ed.) Cobre e ouro formam uma solução contínua com os átomos de cobre e outro distribuídos estatisticamente nos stios de uma rede fcc. Para quais concentrações relativas dos átomos de cobre e ouro você espera ligas ordenadas e como elas seriam? Desenhe as células unitárias dessas ligas e identifique as células de Bravais respectivas. Que experimento poderia determinar se a liga é ordenada ou não? Descreva o resultado em ambos os casos (i.e., para aquele que você já não fez).

4. (Extraído do Jones, cap. 8) A Tabela abaixo trás os valores medidos da espessura lamelar inicial para a cristalização do polietileno em várias temperaturas. O ponto de equilíbrio de fusão (T_m^∞) é medido independentemente e tem o valor de $T_m^\infty = 417,8\ K$. (a) Faça um gráfico dos dados e teste a relação da equação $l^* = \frac{a}{\mu} + \frac{2\sigma_e T_m^\infty}{\Delta H_m^\infty (T_m^\infty - T)}$. (b) Qual é o ponto de fusão para cristais formados a 400 K?

Temperatura/K	358,95	368,95	385,75	396,15	397,55
Espessura do cristal/nm	8,9	9,9	12,0	14,1	16,1

Temperatura/K	399,15	400,85	401,65	403,05	404,15	405,55
Espessura do cristal/nm	15,9	17,3	18,2	17,9	20,1	22,2

Table 1: Espessura do cristal e temperatura de cristalização do polietileno.

5. (Extraído do Jones, cap. 8) Uma fração do polietileno monodisperso é sintetizado com a fórmula química $C_{122}H_{246}$. Utiize a relação encontrada para os dados da questão anterior para prever o grau de super-resfriamento

necessário para que a espessura da lamela inicial prevista pela eq. $l^* = \frac{a}{\mu} + \frac{2\sigma_e T_m^\infty}{\Delta H_m^\infty (T_m^\infty - T)}$ corresponda a
(a) um cristal cuja espessura seja exatamente igual a cadeia do polietileno completamente estendida,
(b) um cristal cuja cadeia está enoveladamente exatamente uma única vez.

6. (problema 1, cap. 13, Marder) Considere uma cadeia unidimensional de átomos, na qual cada átomo tem massa M, mas as molas têm valores, K_1 e K_2, alternados de um sítio a outro. Considere apenas interação entre primeiros vizinhos. Encontre as frequências de vibração dessa cadeia em função do vetor de onda q?

7. (baseado no problema 2, cap. 22, Aschroft&Mermin) Considere uma cadeia linear diatômica, com dois átomos diferentes de massa M_1 e M_2, mas mesma constante de mola. Considere apenas interação entre primeiros vizinhos. (a) Encontre as frequências de vibração dessa cadeia em função do vetor de onda q. (b) Discuta a forma da relação de dispersão e a natureza dos modos de vibração quando $M_1 \gg M_2$. (c) Compare a relação de dispersão com a da cadeia linear monoatômica quando $M_1 \approx M_2$.

8. (baseado no problema 3, cap. 22, Aschroft&Mermin) Considere a relação de dispersão para uma cadeia diatômica linear com átomos com mesma massa, M, mas constantes de mola diferentes, K, G:

$$\omega^2 = \frac{K+G}{M} \pm \frac{1}{M}\sqrt{K^2 + G^2 + 2KG\cos(qa)}$$

Considere o caso em que as constantes de mola são muito próximas,

$$\begin{aligned} K &= K_0 + \Delta \\ G &= K_0 - \Delta \\ \Delta &\ll K_0 \end{aligned}$$

(a) Mostre que quando $\Delta = 0$, a relação de disperção reduz-se àquela da cadeia linear monoatômica com acoplamento entre os primeiros vizinhos. Atenção: se o comprimento da célulla unitária primitiva da cadeia diatômica é a, então quando $K = G$ ela se reduzirá a uma cadeia monoatômica com constante de rede igual a $a/2$. Com isso, a primeira zona de Brillouin ($-\pi/a < q < \pi/a$) da cadeia diatômica será apenas metade da zona de Brillouin da cadeia monoatômica ($-\pi/(a/2) < q < \pi/(a/2)$). Mostre que os dois ramos de dispersão (acústico e óptico) da metade da zona de Brillouin tornam-se um único ramo acústico na nova zona de Brillouin, quando completa. Para isso, examine o comportamento das amplitudes quando $\Delta = 0$.

9. (problema 4.2, cap. 4, Ibach&Luth, 2a.ed.) Considere a cadeia monoatômica unidimensional.
(a) Mostre que o momento total $\sum_{n=1}^{N} m\dot{s}_n(t)$ do fônon anula-se.
(b) Mostre que para comprimentos de onda longos ($q \ll a^{-1}$), a equação dinâmica para a cadeia transforma-se em uma equação de onda para ondas elásticas quando os deslocamentos $s_n(t) = s(x = na, t)$, $s_{n+1}(t)$ e $s_{n-1}(t)$ são calculados em séries de Taylor.
(c) Compare a velocidade da onda resultante com a das ondas sonoras em um cilindro longo e determine o módulo efetivo de elasticidad. (para um cilindro longo a velocidade do som é $c = \sqrt{E/\rho}$, onde E é o módulo de elasticidade e ρ a densidade.)

10. (problema 4.3, cap. 4, Ibach&Luth, 2a.ed.) Calcule o autovalor da frequência de uma cadeia linear com um defeito com massa $M \neq m$ na posição $n = 0$, onde m é a massa dos átomos da cadeia e M a massa do defeito (isótopo), utilizando o *ansatz* $s_n = s_0 e^{-\kappa(\omega)|n| - i\omega t}$ para os deslocamentos. O acoplamento entre os átomos é representado por moloas entre os primeiros vizinhos com constante de mola κ. Para qual valores de M ocorrem vibrações localizadas?

11. Considere um espectrômetro de três-eixos para experimentos de espectroscopia de neutrons. O espalhamento inelástico de neutrons é realizado com um feixe de neutrons com comprimento de onda $\lambda = 2,502 \pm 0,002$ Å. O cristal analisador permite uma seletividade do comprimento de onda com acurácia igual a $\Delta\lambda/\lambda = 10^{-3}$. Qual é a resolução em energia do espectrômetro nessa configuração? (expresse o resultado em % e em meV).