

## F888 - Física do Estado Sólido

### PROVA 1 - 2o. semestre 2009

**1-Ligação Iônica.** Seja  $U_{ij}$  a energia interação entre os átomos  $i$  e  $j$  e  $U_i$  a soma sobre todas as interações envolvendo o  $i$ -ésimo átomo,  $U_i = \sum_{j \neq i} U_{ij}$ . Consideramos apenas a interação eletrostática entre os átomos mais uma parte repulsiva tipo exponencial que atua apenas nos primeiros vizinhos:

$$\begin{aligned} U_{ij} &= \lambda \exp(-R/\rho) - \frac{q^2}{R} && \text{(entre os primeiros vizinhos)} \\ &= \pm \frac{q^2}{p_{ij}R} && \text{(todos os outros átomos)} \end{aligned}$$

onde  $\rho$  e  $\lambda$  são constantes,  $R$  é a distância entre os primeiros vizinhos,  $p_{ij}$  são constantes que dependem da distância entre os átomos, o sinal positivo refere-se a interação entre átomos iguais e o negativo entre átomos diferentes.

(a) (1,0 ponto) Seja  $z$  o número de primeiros vizinhos,  $A$  a constante de Madelung (definida positivamente), calcule a posição de equilíbrio do sistema,  $R_0$ .

(b) (0,5 pt.) Encontre a energia total para uma rede com  $2N$  átomos (e  $N$  ligações iônicas),  $U_{tot} = NU_i$ , no equilíbrio em função de  $R_0, q, \rho, N, A$ .

**2-Rede recíproca.** (1,0 pt.) Considere a rede cristalina bidimensional com vetores de rede  $\vec{a}_1$  e  $\vec{a}_2$ , conforme mostrado na figura abaixo.

(a) Esquematize a rede recíproca.

(b) Expresse os vetores da rede recíproca em termos dos vetores de rede dados.

(c) Desenhe a primeira zona de Brillouin (célula de Wigner-Seitz da rede recíproca).

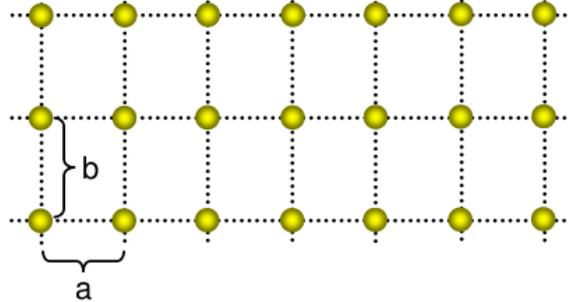


Figure 1: Rede cristalina retangular.

**3-Fator de estrutura.** Considere a liga de cobre e ouro,  $AuCu_3$ . Acima da temperatura crítica de  $390^\circ\text{C}$  os átomos encontram-se distribuídos aleatoriamente em uma estrutura cristalina tipo fcc, com cada sítio tendo a probabilidade  $1/4$  de ser ocupado por um átomo de  $Au$  e  $3/4$  por um átomo de  $Cu$ . Assumindo que a distribuição é completamente aleatória, podemos assumir que a rede da liga metálica é equivalente a uma rede ocupada por um *átomo médio* composto pela média de ocupação de cada átomo. Para temperaturas abaixo da temperatura crítica, a liga forma uma rede ordenada, com os átomos de  $Au$  ocupando os vértices do cubo da fcc e os átomos de  $Cu$  ocupando as faces da fcc, (ver figura abaixo). Considere  $f_{Au}$  e  $f_{Cu}$  os fatores de espalhamento atômico dos átomos de  $Au$  e de  $Cu$  respectivamente. Os átomos que compõe a célula primitiva da fcc encontram-se nas posições  $(0,0,0)$ ,  $\frac{a}{2}(1, 1, 0)$ ,  $\frac{a}{2}(0, 1, 1)$  e  $\frac{a}{2}(1, 0, 0)$  onde  $a$  é a aresta do cubo.

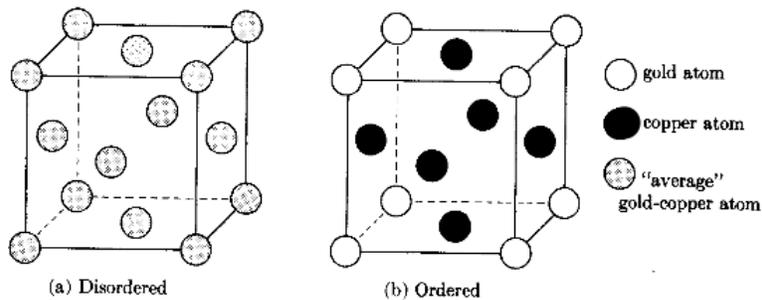


Figure 2: (a) Célula unitária da liga  $AuCu_3$  com distribuição aleatória e (b) ordenada.

(a) (1,0 pt.) Calcule o fator de estrutura da rede desordenada do  $AuCu_3$  acima da temperatura crítica. Discuta o resultado.

(b) (1,0 pt.) Calcule o fator de estrutura da rede ordenada, abaixo da temperatura crítica. Discuta o resultado.

(c) (1,0 pt.) Considere a condição de Bragg de espalhamento,  $\lambda = 2d_{hkl} \sin \theta$ , onde  $d_{hkl} = a/\sqrt{N}$  e  $N = h^2 + k^2 + l^2 = 1, 2, 3, \dots$  para redes cúbicas. Considere a energia dos raios X incidentes fixa (i.e.,  $\lambda$  é constante). Esquematize a posição relativa e intensidade relativa dos picos de Bragg dos ítems (a) e (b) em função de  $\theta$ . Considere as sete primeiras reflexões. Despreze eventual dependência angular nos fatores de espalhamento atômico  $f_{Au}$  e  $f_{Cu}$ . Comente o resultado.

**4-Forças de van-der-Waals.** O modelo clássico para as forças de van-der-Waals considera a interação entre dois osciladores harmônicos simples idênticos (dipolos oscilantes) a uma separação  $R$ . Cada dipolo consiste de um par de cargas opostas com separação entre as cargas igual a  $x_1$  e  $x_2$  respectivamente para os dois dipolos. A força restauradora agindo entre cada par de cargas é proporcional a  $k$ . O Hamiltoniano  $H_0$  para os dois osciladores sem levar em consideração a interação entre as cargas é

$$H_0 = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{1}{2}kx_1 + \frac{p_2^2}{2m} + \frac{1}{2}kx_2$$

e a contribuição da energia de interação,  $H_1$  para as cargas pode ser aproximada considerando  $R \gg x_1, x_2$  na forma

$$H_1 \approx -\frac{2e^2x_1x_2}{R^3}$$

(a) (0,9 pt.) Mostre que a transformação de coordenadas

$$\begin{aligned}x_s &= \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1 + x_2) \\x_a &= \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1 - x_2) \\p_s &= \frac{1}{\sqrt{2}}(p_1 + p_2) \\p_a &= \frac{1}{\sqrt{2}}(p_1 - p_2)\end{aligned}$$

desacopla a energia total  $H = H_0 + H_1$  em uma contribuição simétrica e outra anti-simétrica.

(b) (0,8 pt.) Calcule as frequências  $\omega_1$  e  $\omega_2$  dos modos de vibração normais simétricos e anti-simétricos. Calcule as frequências  $\omega_1$  e  $\omega_2$  expandindo em série de Taylor para  $R^3 k/2e^2 \gg 1$  muito grande e limite a expansão até o termo de segunda ordem em  $2e^2/kR^3$ .

(c) (0,8 pt.) Encontre a energia total do sistema acoplado ( $U = -\frac{1}{2}\hbar(\omega_s + \omega_a)$ ) e mostre que ela é a energia do sistema desacoplado diminuída de um termo  $-c/R^6$  onde  $c$  é uma constante.

**5-Fator de estrutura.** (a) (1,0 pt.) 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) (1,0 pt.) Considere que um cristal que não é centro-simétrico e com dois átomos diferentes por célula unitária, separados por uma distância  $R$ . Seja  $f_0$  e  $f_1$  os fatores de espalhamento atômico dos dois átomos quando a frequência do raio X incidente está longe da energia de absorção. Assuma agora que a frequência de raios X é escolhida próxima de um valor  $\omega_0$  para o qual um dos átomos tenha uma ressonância de absorção (átomo na origem, por exemplo). Assuma que, nesse caso, 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. Nesse caso, o fator de espalhamento pode ser escrito em termos de uma amplitude de espalhamento e uma fase na forma:  $f(\omega) \sim f_0/(\omega - \omega_0 + i\eta)$ . Mostre que a intensidade de espalhamento contém agora a informação que permite deduzir se o cristal é ou não centro-simétrico.