FI 104 - Lista 2

Exercício 1 - Grafeno

(a) Encontre os vetores da rede recíproca do grafeno. Calcule o fator de estrutura para o grafeno.
(c) Identifique na figura 31 da parte 3.3 (padrão de difração do grafeno), reproduzida abaixo, os vetores de espalhamento $\vec{q}$.

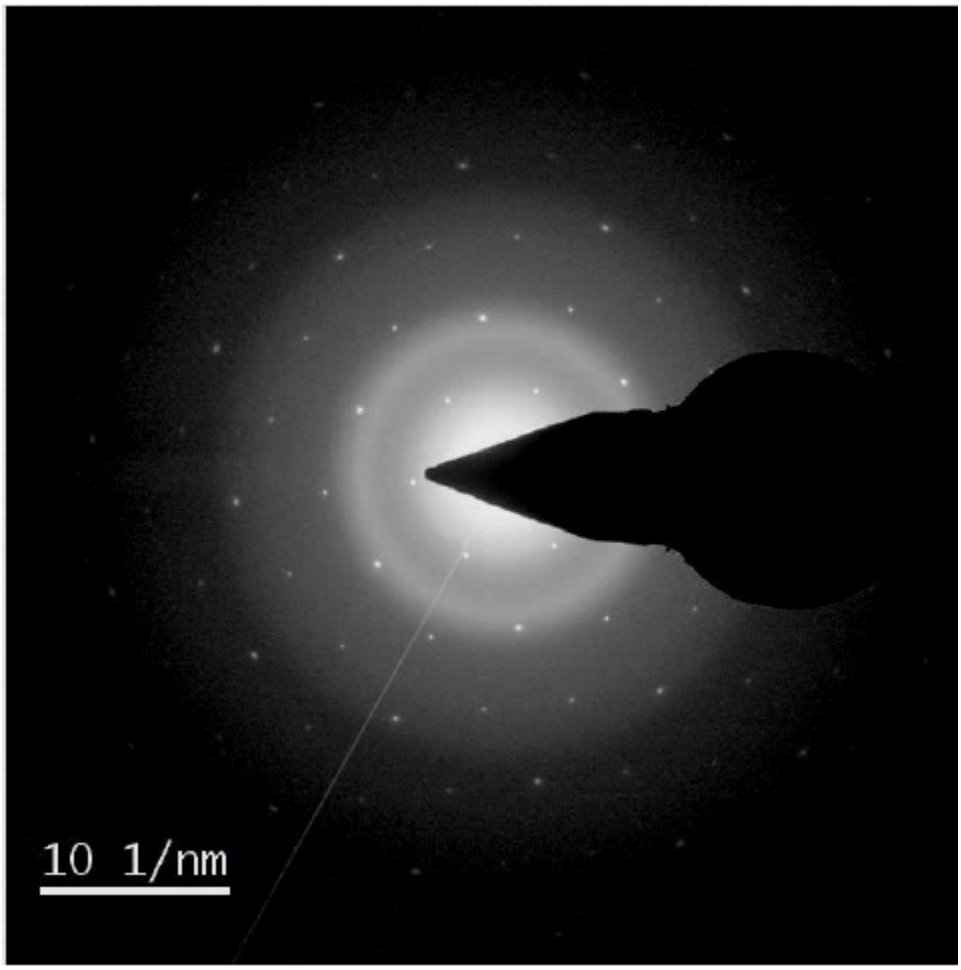

Figure 1: Figura 31 da parte 3.3. Padrão de espalhamento do grafeno.

Exercício 2 - Fullerenos

(a) Encontre o único número de hexágonos que não é possível formar um fullereno a partir de pentágonos e hexágonos de C. Procure "demonstrar" porque essa estrutura não pode exisitir.

(b) Existem outras combinações de pentágonos (doze) e hexágonos (?) que não existem? Quais as restrições?

Exercício 3 - Quasecristais

Pode-se mostrar que uma estrutura quase-cristalina 3D é formada pelo "corte" e "projeção" de uma rede cristalina no hiper-espaço 6D. Um exercício mais simples é mostrar que uma rede quase-cristalina 1D é obtida pelo corte e projeção de uma rede cristalina no espaço 2D. Vamos proceder a esse exercício.

Considere uma rede cristalina quadrada 2D descrita por

$$\rho(x,y) = \sum_{n,m} \delta(x - na)\delta(y - ma)$$

Escolha uma direção de projeção $R_{//}$ a um ângulo α do eixo-x. Uma rede quase periódica é obtida se projetarmos os pontos na direção $R_{//}$ que estão dentro de um intervalo Δ na direção $R_{\perp}$, perpendicular a $R_{//}$ (ver figura abaixo), contanto que Δ não seja muito larga.

Considere agora o caso especial em que $\tan\alpha = \tau$, onde τ é o *Golden number*, isto é,

$$\tau = \frac{1+\sqrt{5}}{2} = 1,618...$$

Mostre que nesse caso a rede quase-periódica é uma rede Fibonacci, isto é, os átomos encontram-se nos pontos de uma sequência de Fibonacci.

Sugestão de referências: Mr (Michael P. Mader, **Condensed Matter Physics**, John Wiley & Sons, Inc, 2a. ed., 2010 (1a. ed. em 2000)) e DG (Feng Duan and Jin Guojun, **Introduction to Condensed Matter**, vol. 1, World Scientific Publishing Co., Singapore, 2005)

Exercício 4 - (Ex. 2.1 Chaikin&Lubenski)

(Modelo de Hendriks-Teller) Em um modelo unidimensional de uma liga, os pontos de massa são separados por uma distância unitária com probabilidade p e por uma distância maior $1+\rho$ com probabilidade $1-p$. Mostre que o fator de estrutura para esse modelo é

$$S(q) = \frac{p(1-p)[1-\cos(\rho q)]}{1 - p(1-p) - p\cos q - (1-p)\cos[(1+\rho)q] + p(1-p)\cos(q\rho)}$$

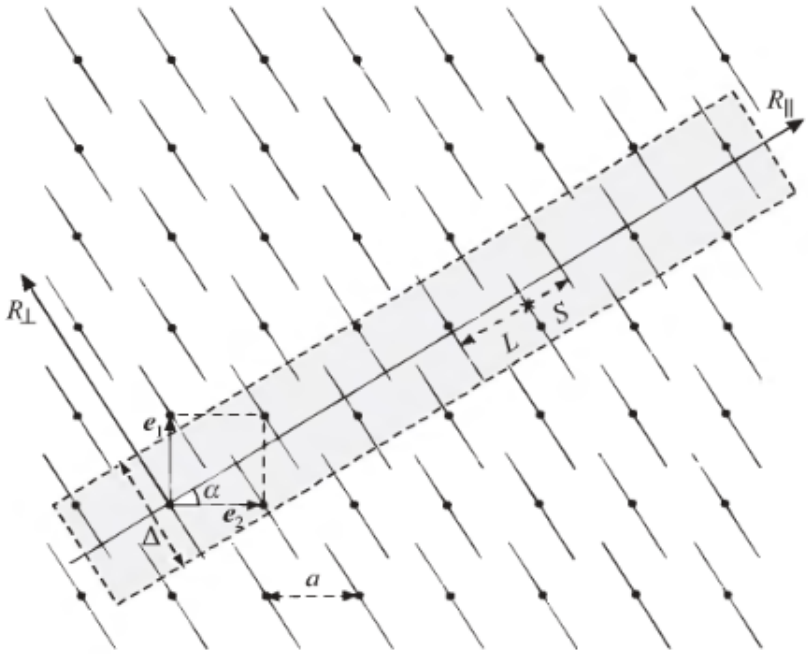

Figure 2: Esquema de corte e projeção de uma rede quadrada 2D para formar uma rede quase-periódica 1D. Extraído de DG.