# Ficha nº 3 de Estado Sólido

Artur Palha nº 46724

27 Março de 2003

## Exercício 7

### a)

Primeiro calcule-se a energia do feixe, em J, sabendo-se que $E = 0.5\text{eV}$. Uma simples regra de três simples fornece-nos o resultado seguinte:

$$E = 8.01 \times 10^{-20}\text{J}$$

Em seguida verifica-se se se está dentro do limite não-relativista, por forma a determinar que expressão utilizar para a determinação do momento linear dos neutrões, para subsequente cálculo do seu comprimento de onda ($\lambda$). Utilizando a expressão clássica para a energia cinética das partículas e igualando-a à energia do feixe:

$$\begin{aligned}\frac{1}{2}m_n v^2 &= 8.01 \times 10^{-20}\text{J} \\ v^2 &= \frac{2 \times 8.01 \times 10^{-20}}{m_n} \simeq 9.6 \times 10^{7}\text{m}^2\text{s}^{-2}\end{aligned}$$

Logo:

$$v \simeq 9780\text{ms}^{-1} \simeq 9.8 \times 10^{3}\text{ms}^{-1}$$

Como $v \ll c$ estamos dentro do limite não relativista pelo que podemos utilizar a expressão usual para o momento linear: $p = mv$. O comprimento de onda $\lambda$ é, como usualmente:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m_n v} \simeq 4.04 \times 10^{-11}\text{m}$$

Logo o módulo do vector de onda é:

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} \simeq 1.6 \times 10^{11}\text{m}^{-1}$$

Os vectores que descrevem convencionalmente a rede *fcc* são:

$$\vec{a} = a\left(0, \tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}\right), \quad \vec{b} = a\left(\tfrac{1}{2}, 0, \tfrac{1}{2}\right), \quad \vec{c} = a\left(\tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}, 0\right).$$

com $a = 4.05 \times 10^{-10}$ a constante de rede. Aos quais correspondem os seguintes vectores da rede recíproca:

$$\vec{A} = \tfrac{2\pi}{a}\left(-1, 1, 1\right), \quad \vec{B} = \tfrac{2\pi}{a}\left(1, -1, 1\right), \quad \vec{C} = \tfrac{2\pi}{a}\left(1, 1, -1\right).$$

Sendo, por definição, $\vec{G} \equiv h\vec{A} + k\vec{B} + l\vec{C}$, tem-se:

$$\vec{G} = \frac{2\pi}{a}\left(k - h + l, h - k + l, h + k - l\right).$$

O que faz com que o módulo de $G$ ($|\vec{G}|$) seja:

$$|\vec{G}| = \frac{2\pi}{a}\sqrt{3\left(h^2+k^2+l^2\right)-2\left(hk+hl+kl\right)}$$

Uma análise dos diversos valores para $|\vec{G}|$, fornece os seguintes menores valores, para os seguintes vectores:

$$h=1, k=1, l=1 \longrightarrow |\vec{G}| = \frac{2\pi}{a}\sqrt{3}$$
$$h=1, k=1, l=0 \longrightarrow |\vec{G}| = \frac{2\pi}{a}\sqrt{4}$$
$$h=1, k=1, l=2 \longrightarrow |\vec{G}| = \frac{2\pi}{a}\sqrt{8}$$
$$h=1, k=2, l=2 \longrightarrow |\vec{G}| = \frac{2\pi}{a}\sqrt{11}$$

Se escolhermos a direcção $x$ do laboratório como sendo a do feixe de neutrões incidente, temos que $\vec{k}_{incidente} = |\vec{k}_{incidente}|\,(1,0,0)_{laboratorio}$. A direcção $z$ pode ser escolhida tal que $\vec{G}$ fique no plano $xz$ do laboratório.

Utilizando a condição de Laue:

$$|\vec{k}_{incidente} + \vec{G}| = |\vec{k}_{reflectido}|$$

e observando o esquema da figura 1, verifica-se que:

$$\theta = \arcsin\left(\frac{|\vec{G}|}{2|\vec{k}_{incidente}|}\right)$$

Calculando para os diversos $|\vec{G}|$:

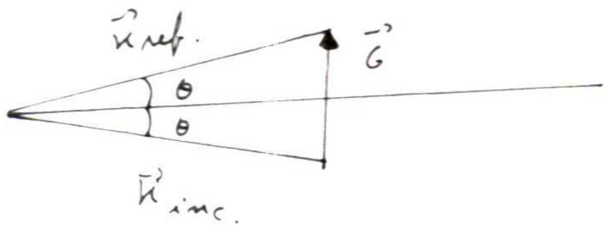



Figura 1: Esquema de reflexão.

$$|\vec{G}| = \frac{2\pi}{a}\sqrt{3} \longrightarrow \theta_1 \simeq 0.084\text{rad} \simeq 4.82^{\text{o}}$$
$$|\vec{G}| = \frac{2\pi}{a}\sqrt{4} \longrightarrow \theta_2 \simeq 0.097\text{rad} \simeq 5.56^{\text{o}}$$
$$|\vec{G}| = \frac{2\pi}{a}\sqrt{8} \longrightarrow \theta_3 \simeq 0.138\text{rad} \simeq 7.88^{\text{o}}$$
$$|\vec{G}| = \frac{2\pi}{a}\sqrt{11} \longrightarrow \theta_4 \simeq 0.161\text{rad} \simeq 9.25^{\text{o}}$$

Note-se que não é necessário orientar o cristal visto que não se trata de um monocristal mas sim de um multicristal. Assim sendo os quatro menores ângulos de difracção serão o dobro dos ângulos já referidos, ou seja:

$$2\theta_1 = 9.64^\circ, \quad 2\theta_2 = 11.12^\circ, \quad 2\theta_3 = 15.76^\circ, \quad 2\theta_4 = 18.5^\circ$$

## b)

Ir-se-à fazer o estudo para o ângulo mais pequeno, para os outros ângulos o procedimento é idêntico.

Como se viu anteriormente, o comprimento do vector mais pequeno da rede recíproca é $|\vec{G}_{(111)}| = \frac{2\pi}{a}\sqrt{3}$.

Com a orientação de eixos definida no enunciado do problema temos que $\vec{k}_{incidente} = |\vec{k}_{incidente}|\,(1,0,0)_{laboratorio}$.

Uma análise da figura 2, conduz-nos ao seguinte resultado:

$$\begin{aligned}\vec{G}_{111} &= \frac{2\pi}{a}\,(1,1,1)_{cristal}\\ &= \frac{2\pi}{a}\,(\cos\theta - \sin\theta, \cos\theta + \sin\theta, 1)_{laboratorio}\end{aligned}$$

Para termos um pico associado a $\vec{G}_{111}$ temos de verificar a condição de Laue:

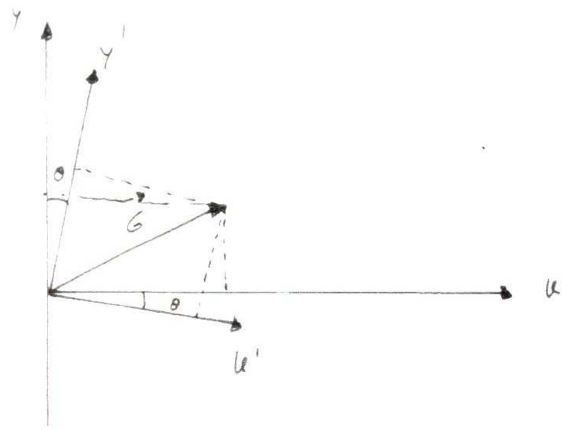



Figura 2: Mudança de referencial.

$$|\vec{k}_{incidente} + \vec{G}| = |\vec{k}_{reflectido}|$$

Logo, no referencial do laboratório, teremos:

$$\vec{k}_{incidente} + \vec{G} = \left(|\vec{k}_{incidente}| + \frac{2\pi}{a}\left(\cos\theta - \sin\theta\right), \frac{2\pi}{a}\left(\cos\theta + \sin\theta\right), \frac{2\pi}{a}\right)$$

Igualando ao vector de onda difractado:

$$\left(k + \frac{2\pi}{a}\left(\cos\theta - \sin\theta\right)\right)^2 + \left(\frac{2\pi}{a}\left(\cos\theta + \sin\theta\right)\right)^2 + \left(\frac{2\pi}{a}\right)^2 = k^2$$

O que resulta em:

$$\frac{4\pi}{ka} = \sin\theta - \cos\theta$$

Resolvendo esta equação no `Mathematica`, obtém-se:

$$\theta \simeq 52.9^\circ$$

Ou seja, com a orientação apresentada no enunciado, teria-se de rodar o cristal $52.9^o$ no sentido dos ponteiros dos relógios, para se observar a difracção referente a $\vec{G}_{(111)}$, de igual forma para os outros vectores $\vec{G}$.

## Exercício 8

Tratando-se de uma estrutura hcp, os vectores da rede são os apresentados na figura 3. Observando

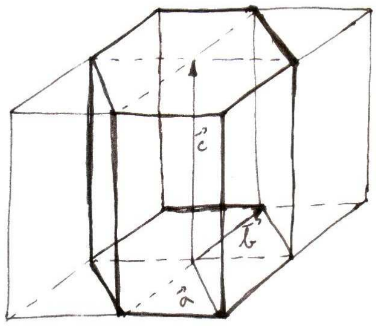


Figura 3: Estrutura hcp.

a base do prisma hexagonal, figura 4, verifica-se que:

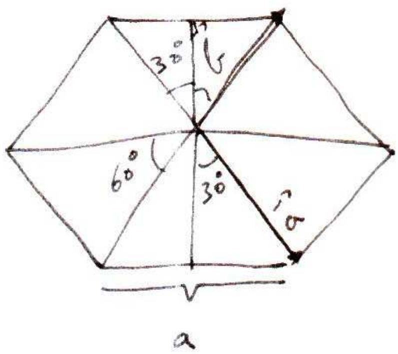



Figura 4: Um pouco de trigonometria.

$$
\begin{aligned}
\vec{a} &= \frac{a}{2}\left(\sqrt{3}, 1, 0\right) \\
\vec{b} &= \frac{a}{2}\left(\sqrt{3}, 1, 0\right) \\
\vec{b} &= c\,(0, 0, 1)
\end{aligned}
$$

Os vectores da rede recíproca $(\vec{A}, \vec{B}, \vec{C})$, saiem directamente da sua definição:

$$
\begin{aligned}
\vec{A} &= \frac{2\pi}{\vec{a}\cdot\vec{b}\times\vec{c}}\,\vec{b}\times\vec{c} \\
\vec{B} &= \frac{2\pi}{\vec{a}\cdot\vec{b}\times\vec{c}}\,\vec{c}\times\vec{a} \\
\vec{C} &= \frac{2\pi}{\vec{a}\cdot\vec{b}\times\vec{c}}\,\vec{a}\times\vec{b}
\end{aligned}
$$

Logo, obtém-se o seguinte resultado:

$$\vec{A} = \frac{2\pi}{a}\left(\frac{\sqrt{3}}{3}, 1, 0\right)$$
$$\vec{B} = \frac{2\pi}{a}\left(\frac{-\sqrt{3}}{3}, 1, 0\right)$$
$$\vec{C} = \frac{2\pi}{c}(0, 0, 1)$$

Lembrando que $a = 2.51$Å e $c = 4.07$Å.

## Exercício 9

Com os dados indicados no enunciado construíram-se os gráficos apresentados na figura 5.

### a)

O que sucedeu foi o nosso átomo ficar $\frac{5\sqrt{2}}{2}$vezes mais estreito e a sua transformada de Fourier ficou $\frac{5\sqrt{2}}{2}$ mais larga. Outra coisa que se verificou foi o facto de os picos mais afastados ficarem mais visíveis.

### b)

O número de átomos foi reduzido em $\frac{1}{3}$, logo o cristal ficou reduzido a $\frac{1}{3}$ do seu tamanho. Este facto fez com que a largura dos picos da transformada de Fourier ficaram 3 vezes mais largos.

### c)

Esta diminuição na constante de rede de 2 para $\frac{2}{3}$fez com que a distância entre os picos aumentasse $\frac{4}{3}$. Como se pode ver do desenho a distância entre picos passou de 0.75cm para 1cm.

### d)

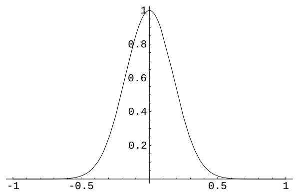
O terceiro pico desapareceu.

### e)

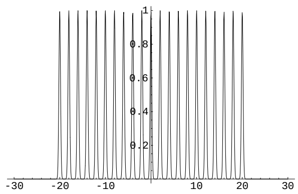
O terceiro pico desapareceu e o último pico (visível) ficou mais intenso.

### f)

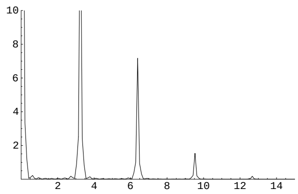
Quanto maior o efeito do piparote mais ruído surge entre os picos e estes ficam, também, mais pequenos.



(a) Atomo

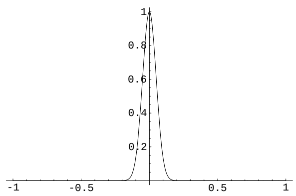


(b) Cristal

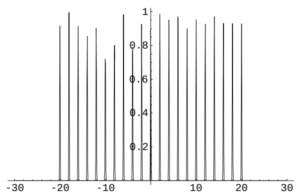


(c) Difraccao

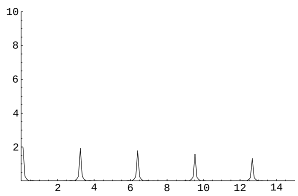
Figura 5: Caso inicial



(a) Atomo

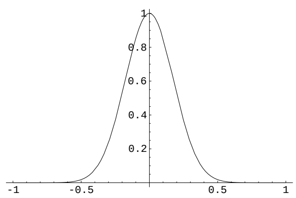


(b) Cristal

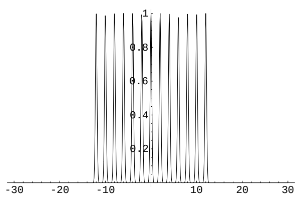


(c) Difraccao

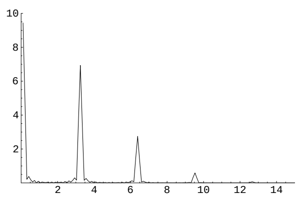
Figura 6: a)



(a) Atomo

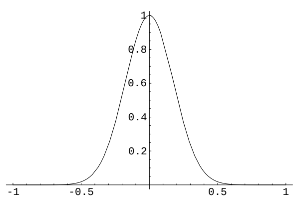


(b) Cristal

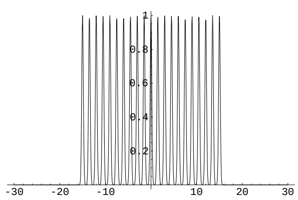


(c) Difraccao

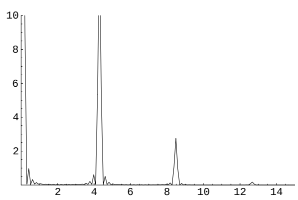
Figura 7: b)



(a) Atomo

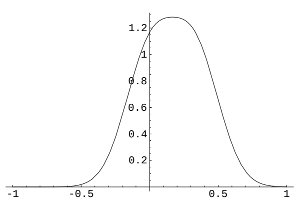


(b) Cristal

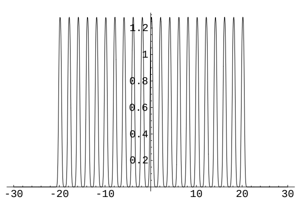


(c) Difraccao

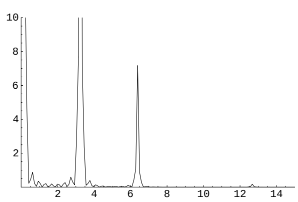
Figura 8: c)



(a) Atomo

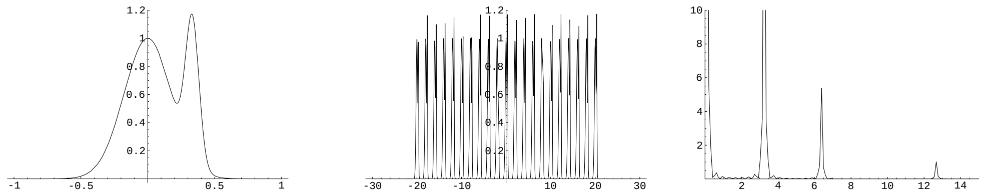


(b) Cristal



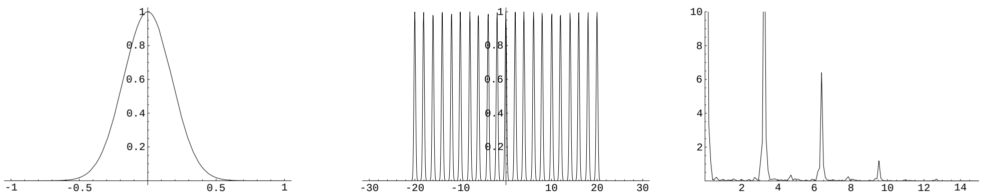
(c) Difraccao

Figura 9: d)



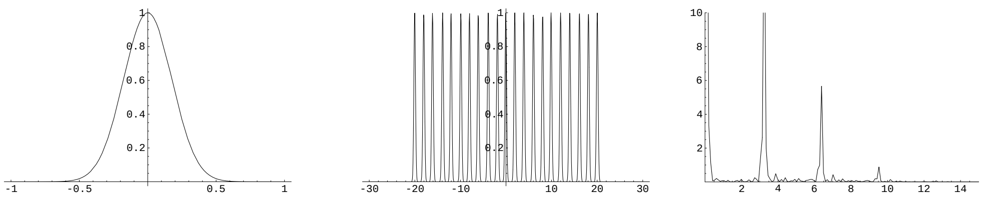
(a) Atomo (b) Cristal (c) Difraccao

Figura 10: e)



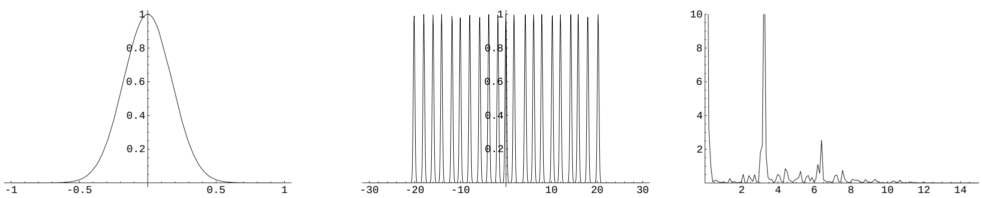
(a) Atomo (b) Cristal (c) Difraccao

Figura 11: f)1/5 piparote



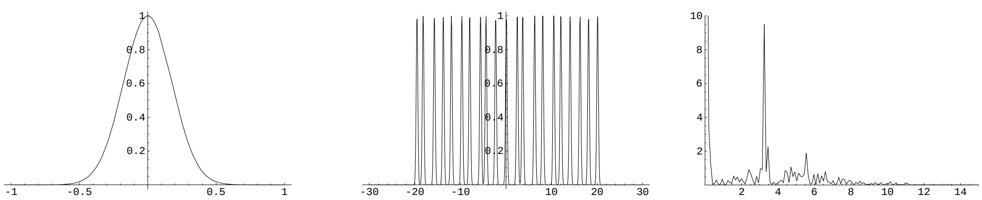
(a) Atomo (b) Cristal (c) Difraccao

Figura 12: f) 1/4 piparote



(a) Atomo (b) Cristal (c) Difraccao

Figura 13: f) 1/2 piparote



(a) Atomo (b) Cristal (c) Difraccao

Figura 14: f) 2 piparote