

Ficha nº 4 de Estado Sólido

Artur Palha nº 46724

6 Abril de 2003

Exercício 10

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 (λ). 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 λ 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 da rede convencional, uma vez que esta é cúbica simples, são:

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

Utilizando as condições de Laue:

$$\begin{cases} \vec{a} \cdot \Delta\vec{k} = a\Delta k_x = 2\pi h \\ \vec{b} \cdot \Delta\vec{k} = a\Delta k_y = 2\pi l \\ \vec{c} \cdot \Delta\vec{k} = a\Delta k_z = 2\pi m \end{cases}$$

Logo:

$$|\Delta\vec{k}| = \frac{2\pi}{a} \sqrt{h^2 + l^2 + m^2}$$

Pela figura 1 verifica-se que:

$$\frac{1}{2}\Delta k = k \sin \theta$$

O que significa que:

$$\sin \theta = \frac{\Delta k}{2k} \quad (1)$$

Determinemos os Δk mais pequenos, pois, analisando a equação 1 verifica-se que os menores

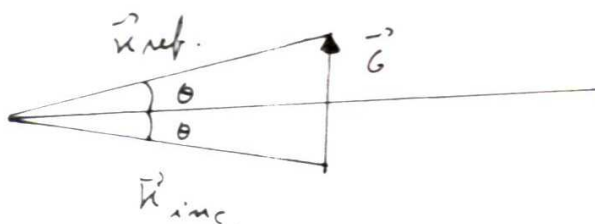


Figura 1: Esquema de difracção.

ângulos são obtidos pelos menores Δk :

$$\Delta k = \frac{2\pi}{a} \rightarrow \theta_1 \simeq 2.8^\circ$$

$$\Delta k = \frac{2\pi}{a}\sqrt{2} \rightarrow \theta_2 \simeq 3.9^\circ$$

$$\Delta k = \frac{2\pi}{a}\sqrt{3} \rightarrow \theta_3 \simeq 4.8^\circ$$

$$\Delta k = \frac{2\pi}{a}\sqrt{4} \rightarrow \theta_4 \simeq 5.6^\circ$$

$$\Delta k = \frac{2\pi}{a}\sqrt{5} \rightarrow \theta_5 \simeq 6.2^\circ$$

$$\Delta k = \frac{2\pi}{a}\sqrt{6} \rightarrow \theta_6 \simeq 6.8^\circ$$

Os ângulos serão 2θ .

b)

A expressão para o factor de estrutura é dado por:

$$S_G(h, l, m) = \sum_j f_j e^{-i\vec{G}\cdot\vec{r}_j}$$

onde $\vec{r}_j = x_j\vec{a} + y_j\vec{b} + z_j\vec{c}$ e:

$$\vec{r}_1 = (0, 0, 0)$$

$$\vec{r}_2 = \left(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right)$$

$$\vec{r}_3 = \left(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$$

$$\vec{r}_4 = \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right)$$

Para a fcc, que é o nosso caso, ficamos com:

$$S_G(h, l, m) = \sum_j = f \left(1 + e^{-i\pi(l+m)} + e^{-i\pi(h+m)} e^{-i\pi(l+h)} \right)$$

Facilmente se verifica que o factor de estrutura é igual a $4f$ quando h, l, m forem ou todos pares ou todos ímpares. No caso de terem paridades diferentes o factor de estrutura toma um valor nulo.

Assim sendo os picos que serão suprimidos são os correspondentes aos seguintes θ 's: $\theta_1, \theta_2, \theta_5$ e θ_6 . restando apenas θ_3 e θ_4 , que são os menores θ 's visíveis para a rede fcc, calculados na ficha anterior.

Exercício 11

Uma vez que são iões com apenas uma carga em excesso (ou em falta) a energia de atracção é simplesmente dada por:

$$E_{\text{at}} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R}$$

O que faz com que a energia total seja:

$$E_{\text{tot}}(R) = E_{\text{at}} + E_{\text{rep}} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R} + A e^{-\frac{R}{\rho}}$$

a)

A energia de coesão é a energia de equilíbrio do sistema, que é um mínimo da energia total:

$$E'_{\text{tot}} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R^2} - \frac{A}{\rho} e^{-\frac{R}{\rho}} = 0$$

Esta equação é uma equação transcendental e a sua solução é dada, numericamente, pelo **Mathematica**: 3.1×10^{-10} m.

Introduzindo este valor na função da energia, obtemos que a energia de coesão é: 6.6×10^{-19} J.

b)

Como foi visto na alínea anterior, o comprimento da ligação é de 3.1×10^{-10} m.

c)

Expandindo a energia total em série de Taylor em torno da distância de equilíbrio $R_0 = 2.9 \times 10^{-12}$ m:

$$E_{\text{tot}}(R) = E_{\text{tot}}(R_0) + \left. \frac{dE_{\text{tot}}}{dR} \right|_{R_0} (R - R_0) + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2 E_{\text{tot}}}{dR^2} \right|_{R_0} (R - R_0)^2 + \mathcal{O} \left((R - R_0)^3 \right)$$

Desprezando os termos de $\mathcal{O} \left((R - R_0)^3 \right)$ e tomando em consideração que nos encontramos num extremo, pode-se fazer a aproximação:

$$E_{\text{tot}}(R) \simeq E_{\text{tot}}(R_0) + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2 E_{\text{tot}}}{dR^2} \right|_{R_0} (R - R_0)^2$$

A constante não tem qualquer significado uma vez que podemos tomar o zero onde nos aprouver. Igualando este resultado ao de um oscilador harmónico $\frac{1}{2}kR^2$, deduz-se que:

$$k = \left. \frac{d^2 E_{\text{tot}}}{dR^2} \right|_{R_0} \simeq 56.99 \text{ Nm}^{-1}$$

A frequência de vibração de um oscilador harmónico de massa μ é:

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$

No nosso caso $\mu = \frac{m_K m_{Cl}}{m_K + m_{Cl}}$, é a massa reduzida. Assim, a frequência fica $\omega = 7.8 \times 10^{11} \sqrt{\frac{56.99}{18.58}} \simeq 1.36 \times 10^{12} \text{ Hz}$.

Exercício 12

a)

A frequência de vibração não depende da amplitude de vibração.

b)

A primeira derivada é, aproximadamente:

$$\frac{dx}{d\tau} = \frac{x(\tau + \frac{\Delta\tau}{2}) - x(\tau - \frac{\Delta\tau}{2})}{\Delta\tau}$$

Utilizando a mesma expressão, agora para a segunda derivada:

$$\frac{d^2x}{d\tau^2} = \frac{\frac{d}{d\tau}x(\tau + \frac{\Delta\tau}{2}) - \frac{d}{d\tau}x(\tau - \frac{\Delta\tau}{2})}{\Delta\tau}$$

O que resulta em:

$$\frac{d^2x}{d\tau^2} = \frac{x(\tau + \Delta\tau) + x(\tau - \Delta\tau) - 2x(\tau)}{\Delta\tau^2}$$

O que é simplesmente, igualando à segunda derivada:

$$x(\tau + \Delta\tau) = (2 - \Delta\tau^2)x(\tau) - x(\tau - \Delta\tau)$$

Uma estimativa do erro é obtida, simplesmente, de uma outra forma de dedução do algoritmo:

$$\begin{aligned} x(\tau + \Delta\tau) &= x(\tau) + \left. \frac{dx}{d\tau} \right|_{\tau} \Delta\tau + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2x}{d\tau^2} \right|_{\tau} \Delta\tau^2 + \frac{1}{3!} \left. \frac{d^3x}{d\tau^3} \right|_{\tau} \Delta\tau^3 + \mathcal{O}(\Delta\tau^4) \\ x(\tau - \Delta\tau) &= x(\tau) - \left. \frac{dx}{d\tau} \right|_{\tau} \Delta\tau + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2x}{d\tau^2} \right|_{\tau} \Delta\tau^2 - \frac{1}{3!} \left. \frac{d^3x}{d\tau^3} \right|_{\tau} \Delta\tau^3 + \mathcal{O}(\Delta\tau^4) \end{aligned}$$

Somando as duas equações obtém-se:

$$x(\tau + \Delta\tau) = 2x(\tau) + \left. \frac{d^2x}{d\tau^2} \right|_{\tau} \Delta\tau^2 - x(\tau - \Delta\tau) + \mathcal{O}(\Delta\tau^4)$$

De onde se conclui que o erro é de $\mathcal{O}(\Delta\tau^4)$.

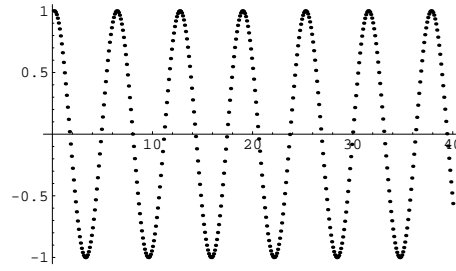


Figura 2: Trajectória

c)

Implementado o algoritmo obtém-se o gráfico das trajectórias presente na figura 2. O período é dado por $6.25\sqrt{\frac{M}{k}}$ e a frequência é o inverso $0.16\sqrt{\frac{k}{M}}$.

d)

O sistema de equações diferenciais que regem este sistema são:

$$M\ddot{x}_1 = -\frac{k}{2}x_1 + k(x_2 - x_1)$$

$$M\ddot{x}_2 = -\frac{k}{2}x_2 + k(x_1 - x_2)$$

A implementação do algoritmo de Verlet resulta em:

$$x_1(\tau + \Delta\tau) = -\frac{1}{2}\frac{k}{M}\Delta\tau^2 x_1 + \frac{k}{M}\Delta\tau^2(x_2 - x_1) + 2x_1 - x_1(\tau - \Delta\tau)$$

$$x_2(\tau + \Delta\tau) = -\frac{1}{2}\frac{k}{M}\Delta\tau^2 x_2 + \frac{k}{M}\Delta\tau^2(x_1 - x_2) + 2x_2 - x_2(\tau - \Delta\tau)$$

Fazendo a mesma mudança de variáveis, para o tempo natural, obtém-se:

$$x_1(\tau + \Delta\tau) = -\frac{1}{2}\Delta\tau^2 x_1 + \Delta\tau^2(x_2 - x_1) + 2x_1 - x_1(\tau - \Delta\tau)$$

$$x_2(\tau + \Delta\tau) = -\frac{1}{2}\Delta\tau^2 x_2 + \Delta\tau^2(x_1 - x_2) + 2x_2 - x_2(\tau - \Delta\tau)$$

Implementando no Mathematica o seguinte código:

```
del = 0.1; n = 4000; q1 = 1., 1.; q2 = 0, 0;
For[i=3, i<n+1, i++, {q1=Append[q1, 2q1[[i-1]]-q1[[i-2]]+(q2[[i-1]]-(3/2)q1[[i-1]])del
del], q2=Append[q2, 2q2[[i-1]]-q2[[i-2]]+(q1[[i-1]]-(3/2)q2[[i-1]])del del]}]
traj1=Table[{i del, q1[[i]]}, {i, 1, n}]
traj2=Table[{i del, q2[[i]]}, {i, 1, n}]
ListPlot[traj1, PlotRange->All];
ListPlot[traj2, PlotRange->All];
intensidade=Abs[Fourier[q1]]*Abs[Fourier[q1]];
lista=Table[N(1/400)*j, intensidade[[j]], j, 1, n];
ListPlot[lista, PlotRange->All];
MatrixForm[lista]
intensidade=Abs[Fourier[q2]]*Abs[Fourier[q2]];
lista=Table[N(1/400)*j, intensidade[[j]], j, 1, n];
ListPlot[lista, PlotRange->All];
MatrixForm[lista]
```

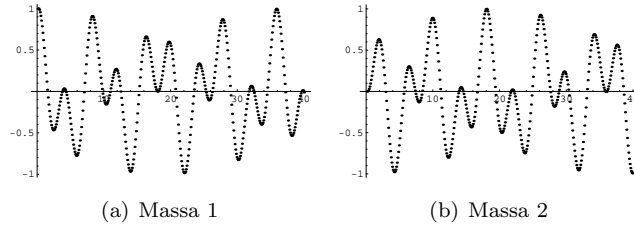


Figura 3: d)

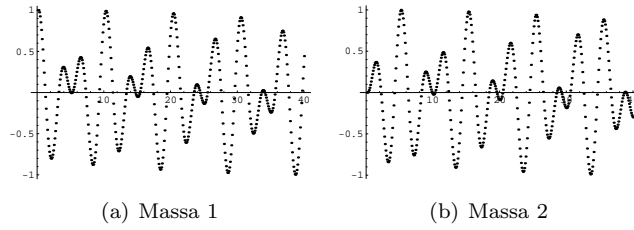


Figura 4: e)

Obtendo-se os gráficos presentes nas figuras 3 Com o resultado da transformada de Fourier obtém-se os seguintes valores para as frequências: $0.15\sqrt{\frac{k}{M}}$ e $0.275\sqrt{\frac{k}{M}}$.

e)

A resolução é exactamente a mesma, mudando apenas uma constante na equação diferencial:

$$M\ddot{x}_1 = -\frac{k}{2}x_1 + 2k(x_2 - x_1)$$

$$M\ddot{x}_2 = -\frac{k}{2}x_2 + 2k(x_1 - x_2)$$

O algoritmo para o método de Verlet fica:

$$x_1(\tau + \Delta\tau) = -\frac{1}{2}\Delta\tau^2\ddot{x}_1 + 2\Delta\tau^2\ddot{x}_2 + 2x_1 - x_1(\tau - \Delta\tau)$$

$$x_2(\tau + \Delta\tau) = -\frac{1}{2}\Delta\tau^2\ddot{x}_2 + 2\Delta\tau^2\ddot{x}_1 + 2x_2 - x_2(\tau - \Delta\tau)$$

Obtendo-se os gráficos presentes nas figuras 4 Com o resultado da transformada de Fourier obtém-se os seguintes valores para as frequências: $0.1975\sqrt{\frac{k}{M}}$ e $0.300\sqrt{\frac{k}{M}}$.