Propriedades Elásticas e Vibrações da Rede Cristalina

1) Determine as frequências próprias de ondas de tracção/compressão numa barra de comprimento L. O material da barra tem o módulo de Young Y e a densidade ρ. Considere os casos de:
   a) As extremidades da barra são fixas (o deslocamento é nulo);
   b) As extremidades da barra são livres (a derivada do deslocamento é nula).

2) Numa deformação plana, as componentes do vector deslocamento são dadas pelas seguintes expressões:
$$u_x = -\alpha\, yz\,; \qquad u_y = \alpha\, xz\,; \qquad u_z = 0\,;$$
em que $\alpha = const$. Calcule as componentes de deformação, ε_{ij}. De que tipo é esta deformação?

3) Tendo em consideração as condições de equilíbrio ($K, \mu > 0$), mostre que existe a seguinte relação entre as velocidades do som longitudinal e transversal num sólido isotrópico:
$$s_l > \sqrt{\frac{4}{3}} s_t\,.$$
(As velocidades do som num sólido isotrópico são dadas por: $s_l = \sqrt{\dfrac{K + 4\mu/3}{\rho}} = \sqrt{\dfrac{\mathrm{E}(1-\nu)}{\rho(1-2\nu)(1+\nu)}}$; $s_t = \sqrt{\dfrac{\mu}{\rho}} = \sqrt{\dfrac{\mathrm{E}}{2\rho(1+\nu)}}$.)

4) As equações de onda para ondas sonoras num cristal cúbico são:
$$\rho \ddot{u}_x = C_{11}\frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + C_{44}\left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial z^2}\right) + \left(C_{12} + C_{44}\right)\left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial x \partial z} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial y \partial x}\right)$$
e as outras duas obtêm-se por uma permutação cíclica entre as componentes x, y e z (os eixos das coordenadas são dirigidos ao longo das arestas do cubo).
   a) Escreva as expressões para as velocidades de som, transversal e longitudinal, para as ondas que propagam ao longo duma direcção (100).
   b) Faça o mesmo para as ondas que propagam ao longo duma direcção (111). Nota: Para estas ondas $u_n = u_y = u_z = A\exp\left[ik(x+y+z)\right) - i\omega t]$.
   c) Obtenha a correspondência entre as constantes elásticas do cristal, C_{ij}, e aquelas que se usam para meios isotrópicos (Y, μ, etc).
   R: $K = \left(C_{11} + 2C_{12}\right)/3$; $\mu = C_{44}$; $Y = \left(C_{11} + 2C_{12}\right)\left(C_{11} - C_{12}\right)/\left(C_{11} + C_{12}\right)$; $\nu = C_{12}/\left(C_{11} + C_{12}\right)$.

5) Considere uma rede quadrada, monoatómica. Os átomos, de massa M, ligados entre si por molas de constante elástica f, interagem apenas quando são os vizinhos mais próximos. A relação de dispersão das vibrações desta rede é dada por:
$$\omega\left(\vec{k}\right) = \sqrt{\frac{4f}{M}}\left[\sin^2\left(k_x a/2\right) + \sin^2\left(k_y a/2\right)\right]^{1/2}$$
onde a e a constante da rede.

a) No limite $k \to 0$; o espectro $\omega(\vec{k})$ é aproximadamente isotrópico. Obtenha a expressão explícita para a densidade de estados de fonão por unidade da área, $g(\omega) = A^{-1}\, dN/d\omega$. R: $g(\omega) = \dfrac{M\omega}{\pi a^2 f}$.

b) No modelo de Debye (isto é, admitindo que existe uma frequência máxima do espectro de fonões, ω_D), calcule o calor específico por átomo, no limite das temperaturas baixas, $k_B T << \hbar\omega$. R: $C_v \propto T^2$

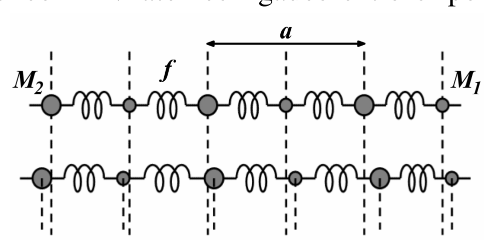
c) No limite das temperaturas altas, $k_B T >> \hbar\omega$, obtenha o valor médio do quadrado de deslocamento dos átomos relativamente às suas posições de equilíbrio.
<u>Nota</u>: Para oscilações harmónicas, metade da sua energia corresponde à energia potencial. R: $\langle u^2 \rangle = 2k_B T/f$.

d) Acha que a rede quadrada é estável a altas temperaturas?

6) Considere uma cadeia monoatómica, constituída por átomos de massa M, tal que a posição $n = 0$ da cadeia é ocupada por um isótopo de massa M_0. Demonstre que este defeito dá origem a um estado vibracional localizado quando $M_0 < M$.
Para o efeito, recorde que a equação de movimento na posição $n = 0$ tem a forma:
$$M_0\omega^2 u_0 = f(u_{-1} + u_1 - 2u_0),$$
enquanto que para $n \neq 0$ tem-se:
$$M\omega^2 u_n = f(u_{n-1} + u_{n+1} - 2u_n).$$
Mostre que o deslocamento dos átomos relativamente à posição de equilíbrio pode ser escrito na seguinte forma:
$$u_n(t) = A\exp[-|n|(i\pi + \alpha) - i\omega t]$$
com $\alpha = \ln(2M/M_0 - 1)$.

7) Determine a energia das vibrações do ponto zero do árgon sólido que tem a estrutura cristalina cúbica de faces centradas (f. c. c.). Mostre que, na aproximação de Debye, a energia do ponto zero tem a forma
$$E_0 = 9N\hbar\omega_D/8.$$
Sabendo que a temperatura de Debye para o árgon sólido é θ_D=92 K, avalie a energia do ponto zero por átomo. Compare o resultado com a energia de coesão por átomo, a qual vale 0.009 eV.

8) Considere uma cadeia unidimensional com $2N$ átomos ligados entre si por molas de constante elástica f, em que cada célula unitária, de comprimento a, contém dois átomos de massas M_1 e M_2. Admita que as molas só ligam os primeiros vizinhos e que os átomos podem movimentar-se apenas ao longo da cadeia (ver a figura).



a) Escreva as equações de movimento para os dois átomos numa célula unitária.
b) Obtenha a expressão para a matriz dinâmica deste sistema.
c) Calcule os valores próprios desta matriz e obtenha a relação de dispersão para as vibrações atómicas.
d) Calcule os deslocamentos dos dois átomos na mesma célula unitária e analise o quociente entre eles no limite dos comprimentos de onda grandes. Identifique os ramos, acústico e óptico, do espectro $\omega(q)$.
e) Calcule a densidade de estados de vibração.

9) Calcule a constante elástica, f, do árgon sólido usando o potencial interatómico de Lennard-Jones,

$$U(r) = -4\varepsilon\left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12}\right],$$

com ε =0.0104 eV e σ =3.40 A°.
Compare o valor numérico da frequência característica das vibrações atómicas, $\omega_0 = \sqrt{f/M}$ (M é a massa do átomo de árgon), com o da frequência de Debye, ω_D, conhecido do Problema 7.

10) Utilizando o potencial interatómico de Lennard-Jones e os parâmetros dados no problema anterior, calcule o parâmetro de Grűneisen, γ, para o árgon sólido.

11) As vibrações térmicas têm influência na difracção de raios X nos cristais fazendo com que os picos de difracção sejam alargados e a sua intensidade diminua com aumento da temperatura. A intensidade da onda difractada, correspondente a um conjunto de planos cristalinos (hkl) é diminuída pelo chamado factor de Debye-Waller,

$$f_{DW} = \exp\left[-\frac{1}{3}\langle u^2\rangle K^2\right]$$

onde K é o menor vector da rede recíproca que corresponde aos índices de Miller (hkl) e $\langle u^2\rangle$ é o valor médio do quadrado de deslocamento dos átomos relativamente às suas posições de equilíbrio.
a) Obtenha o valor de f_{DW} para o árgon sólido a $T = 0$ utilizando o resultado do Problema 8. O valor da constante da rede do cristal (f. c. c.) do árgon sólido é de 5.26 A°.
b) Como varia f_{DW} em função da temperatura?