

Lei de Hooke Generalizada

A lei de Hooke expressa uma relação linear entre a tensão e a deformação:

$$\sigma_{ij} = \sum_{k,l} \Lambda_{ijkl} \epsilon_{kl}$$

Λ_{ijkl} é tensor de constantes elásticas (de 4 - a ordem)

Meios isotrópicos

$$\sigma_{ij} = \left(K - \frac{2}{3} \mu \right) \sum_l \epsilon_{ll} \delta_{ij} + 2\mu \epsilon_{ij}$$

Cristais

Sistema cristalino (grupos de simetria)	Número de parâmetros elásticos independentes	Número de parâmetros de expansão térmica independentes
Triclínico	21	3
Monoclínico	13	3
Rômbico	9	3
Tetragonal (C_4, S_4, C_{4h})	7	2
Tetragonal ($C_{4v}, D_{2d}, D_4, D_{4h}$)	6	2
Romboédrico (C_3, S_6)	7	2
Romboédrico (C_{3v}, D_3, D_{3d})	6	2
Hexagonal	5	2
Cúbico	3	1

**Convenção de atribuição de um numero de 1 a 6
aos pares de índices cartesianos:**

$$xx \rightarrow 1; yy \rightarrow 2; zz \rightarrow 3; yz \rightarrow 4; xz \rightarrow 5; xy \rightarrow 6,$$

$$\sigma_{\alpha} = \sum_{\beta=1}^6 C_{\alpha\beta} \epsilon_{\beta}$$

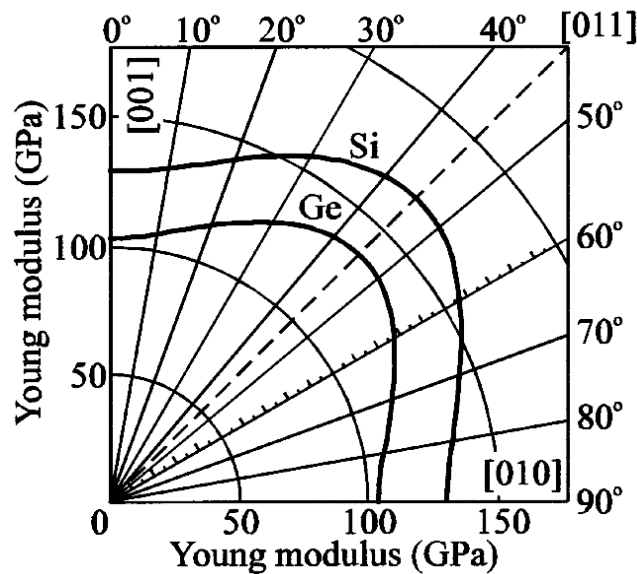
Lei de Hooke nos Cristais

Matriz das constantes elásticas num cristal cúbico:

$$C_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{pmatrix}$$

Anisotropia elástica dum cristal cúbico

Módulo de Young para cristais do silício e do germânio em função do vector \vec{n} no plano (001) do cristal [<http://www.ioffe.ru/>].



$$\frac{1}{E} = \frac{C_{11} + C_{12}}{(C_{11} + 2C_{12})(C_{11} - C_{12})} + \left[\frac{1}{C_{44}} - \frac{2}{(C_{11} - C_{12})} \right] (n_x^2 n_y^2 + n_x^2 n_z^2 + n_y^2 n_z^2)$$

Modos de Vibração de Cristais 3D

Lagrangiano na aproximação harmónica:

$$L = \sum_{l,\alpha} \frac{P_{l\alpha}^2}{2M_\alpha} - \frac{1}{2} \sum_{\substack{l,\alpha \\ l',\alpha'}} \vec{A}_{\alpha\alpha'}^{ll'} \vec{u}_{l'\alpha'} \vec{u}_{l\alpha}$$

l enumera células unitárias (1, 2, ... N), $\alpha = 1, \dots s$ - átomos dentro

duma célula; $\vec{A}_{\alpha\alpha'}^{ll'}$ - matriz de constantes de força.

Equações de movimento:

$$M_\alpha \ddot{\vec{u}}_{l\alpha} = - \sum_{l',\alpha'} \vec{A}_{\alpha\alpha'}^{ll'} \vec{u}_{l'\alpha'}$$

Solução:

$$\vec{u}_{l\alpha}(t) = \vec{b}_\alpha(\vec{q}) \frac{1}{\sqrt{M_\alpha}} \exp[i(\vec{q}\vec{R}_l^0 - \omega t)]$$

$$\sum_{\alpha'} [\vec{\Lambda}_{\alpha\alpha'}(\vec{q}) - \omega^2 \delta_{\alpha\alpha'} \vec{I}] \vec{b}_{\alpha'} = 0 \quad (*)$$

onde \vec{I} é a matriz unidade 3×3 ,

$$\vec{\Lambda}_{\alpha\alpha'}(\vec{q}) = \frac{1}{N \sqrt{M_\alpha M_{\alpha'}}} \sum_{l,l'} \vec{A}_{\alpha\alpha'}^{ll'} \cdot \exp[-i\vec{q}(\vec{R}_l^0 - \vec{R}_{l'}^0)]$$

é a matriz dinâmica da rede.

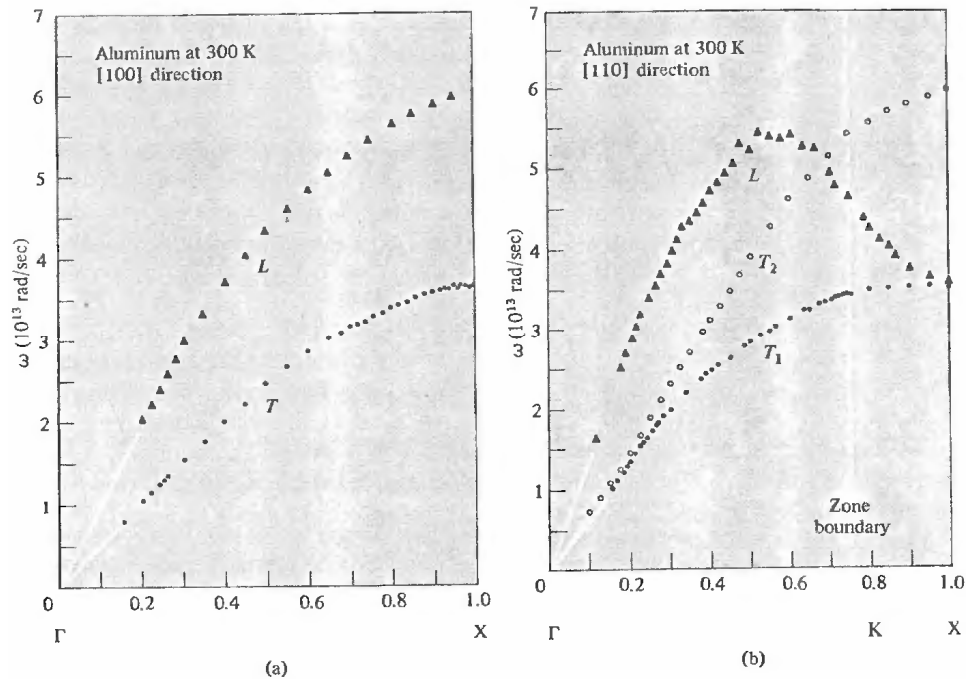
A condição da compatibilidade das equações (*),

$$\det \left| \vec{\Lambda}_{\alpha\alpha'}(\vec{q}) - \omega^2 \delta_{\alpha\alpha'} \vec{I} \right| = 0,$$

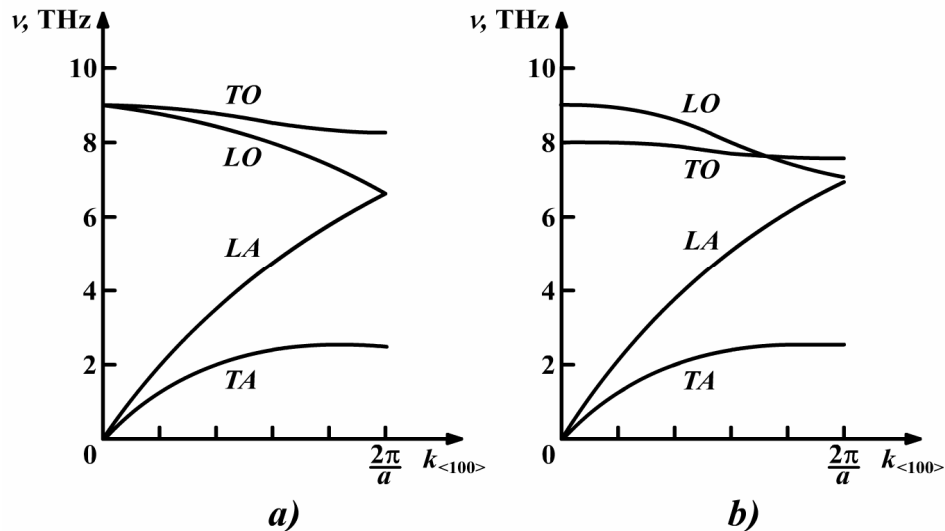
determina as frequências dos modos próprios de vibração do sistema ($3s$ para cada \vec{q}).

Em geral, há $3s$ ramos de valores próprios $\omega(\vec{q})$, chamados curvas de dispersão.

Modos de Vibração de Cristais 3D



Curvas de dispersão das vibrações acústicas para um cristal de Al medidas pela difusão de neutrões, na direcção (100) (a) e (110) (b) [Ashcroft, Mermin].



Apresentação qualitativa de curvas de dispersão das vibrações normais para a) o silício e b) GaAs, com indicação dos modos transversais (TO, TA) e longitudinais (LO, LA).