Universidade do Minho

Problemas de Física da Matéria Condensada – Série 1

1- Uma famía de planos paralelos de um cristal é caraterizada por uma distância interplanar de $d = 2$Å. Se incidirmos numa amostra do cristal radiação X de comprimento de onda $\lambda = 1$Å, para quantos valores do ângulo de Bragg no intervalo $0 < \theta < \frac{\pi}{2}$ se dará difração da radiação nos referidos planos cristalográficos? Justifique a resposta apresentando os cálculos efetuados.

2- Seja a densidade eletrónica de um cristal, $n(\vec{r})$, tal que,

$$n(\vec{r}) \;=\; \sum_{\vec{G}} n_{\vec{G}}\, e^{i\vec{G}.\vec{r}} ,$$

onde $\vec{G}$ são vetores da rede recíproca de forma geral,

$$\vec{G} \;=\; v_1\,\vec{b}_1 + v_2\,\vec{b}_2 + v_3\,\vec{b}_3 ,$$

com v_1, v_2, v_3 números inteiros $0, \pm 1, \pm 2, ...$

Utilize as conhecidas expressões dos vetores primitivos $\vec{b}_1$, $\vec{b}_2$ e $\vec{b}_3$ para mostrar que a função $n(\vec{r})$ apresenta a seguinte simetria de translação,

$$n(\vec{r}) \;=\; n(\vec{r} + \vec{T})$$

onde o vetor de translação é da forma

$$\vec{T} \;=\; u_1\,\vec{a}_1 + u_2\,\vec{a}_2 + u_3\,\vec{a}_3 ,$$

e u_1, u_2, u_3 são números inteiros $0, \pm 1, \pm 2, ...$

3- Considere uma rede cristalina definida pelos seguintes vetores primitivos,

$$\vec{a}_1 \;=\; \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} , \qquad \vec{a}_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} , \qquad \vec{a}_3 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 2 \end{bmatrix}$$

onde as componentes são relativas a um sistema de eixos Cartesiano com vetores de base de módulo 1Å.

a)- Calcule o volume da célula primitiva em Å^3.

b)- Calcule as componentes dos vetores primitivos da rede recíproca.

4- Um cristal é caraterizado pelos seguintes vetores primitivos da rede recíproca,

$$\vec{b}_1 \;=\; \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} , \qquad \vec{b}_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 3 \end{bmatrix} , \qquad \vec{b}_3 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 2 \end{bmatrix}$$

sendo as componentes relativas a um sistema de eixos Cartesiano e dadas em Å^{-1}.

a)- Indique, justificando, quais dos seguintes vetores de onda são vetores da rede recíproca,

$$\vec{k}_1 = \begin{bmatrix} 4 \\ 1/2 \\ 0 \end{bmatrix}, \qquad \vec{k}_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 8 \end{bmatrix}, \qquad \vec{k}_3 = \begin{bmatrix} 3 \\ 2 \\ 1 \end{bmatrix}, \qquad \vec{k}_4 = \begin{bmatrix} 4 \\ 2 \\ 9 \end{bmatrix},$$

sabendo que as respetivas componentes são também dadas em Å^{-1}.

b)- Indique quais os valores dos números inteiros v_1, v_2 e v_3 desses vetores da rede recíproca, que são da forma $\vec{G} = v_1\,\vec{b}_1 + v_2\,\vec{b}_2 + v_3\,\vec{b}_3$.

5- Um cristal bidimensional, para o qual os vetores da rede recíproca são da forma $\vec{G} = v_1\,\vec{b}_1 + v_2\,\vec{b}_2$ onde v_1 e v_2 são números inteiros, é caraterizado pelos seguintes vetores primitivos dessa rede (componentes em Å^{-1} relativas a um sistema de eixos Cartesiano),

$$\vec{b}_1 = \begin{bmatrix} 6 \\ 2 \end{bmatrix}, \qquad \vec{b}_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 4 \end{bmatrix}.$$

Como se sabe, no caso do cristal ser incidido por um feixe de radiação X de vetor de onda $\vec{k}$ e a interação for elástica, a condição de difração é dada por,

$$\vec{k}.\frac{1}{2}\vec{G} = \left(\frac{1}{2}G\right)^2$$

onde $G = |\vec{G}|$.

a)- Construa, numa figura, a primeira zona de Brillouin do cristal.

b)- A partir da análise dessa figura, indique quais os vetores da rede recíproca de forma $\vec{G} = v_1\,\vec{b}_1 + v_2\,\vec{b}_2$ que no presente caso podem ser usados na equação da condição de difração para que o vetor de onda incidente, $\vec{k}$, pertença aos limites da primeira zona de Brillouin. Forneça os números inteiros v_1 e v_2 que os define e o valor da quantidade $\left(\frac{1}{2}G\right)^2$ em Å^{-2} de cada um deles.

c)- Considere os seguintes cinco vetores de onda,

$$\vec{k}_1 = \begin{bmatrix} -1 \\ 2 \end{bmatrix}, \quad \vec{k}_2 = \begin{bmatrix} 3/2 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \vec{k}_3 = \begin{bmatrix} -3 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \vec{k}_4 = \begin{bmatrix} 2 \\ -1 \end{bmatrix}, \quad \vec{k}_5 = \begin{bmatrix} -8/3 \\ -2 \end{bmatrix},$$

onde as respetivas componentes são dadas em Å^{-1}. Represente esses vetores numa figura semelhante à da alínea a), que inclua a primeira zona de Brillouin do cristal e os seus limites, mas não os vetores da rede recíproca $\vec{G}$ da alínea b).

d)- A partir da análise dessa figura, indique quais desses vetores de onda obedecem à condição de difração acima considerada.

e)- Identifique, para cada um deles, qual ou quais os vetores da rede recíproca $\vec{G}$ da alínea b) a que essa condição se aplica, confirmando explicitamente que a correspondente equação $\vec{k}.\frac{1}{2}\vec{G} = \left(\frac{1}{2}G\right)^2$ é satisfeita.