

FÍSICA DO ESTADO SÓLIDO

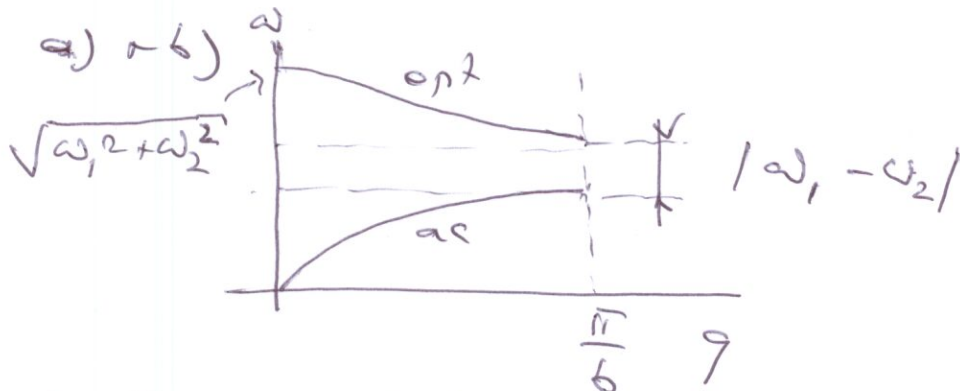
Teste 1

1) (4v) O espectro de vibrações duma cadeia diatómica é dado por:

$$\omega^2 = \frac{1}{2}(\omega_1^2 + \omega_2^2) \pm \sqrt{\frac{1}{4}(\omega_1^2 + \omega_2^2)^2 - \omega_1^2 \omega_2^2 \sin^2\left(\frac{qb}{2}\right)}$$

onde $\omega_{1,2}^2 = 2f/M_{1,2}$, f é a rigidez das molas e $M_{1,2}$ são as massas atômicas.

- Faça um gráfico qualitativo do espectro $\omega(q)$.
- Qual é a largura do *gap* de frequências entre os ramos, óptico e acústico?
- Calcule as velocidades de grupo para os dois ramos no limite dos comprimentos de onda grandes ($q \rightarrow 0$)
- Como se modifica o espectro acima apresentado no caso $M_1 = M_2$? Faça um desenho explicativo.



c) Ramo acústico, $q \rightarrow 0$

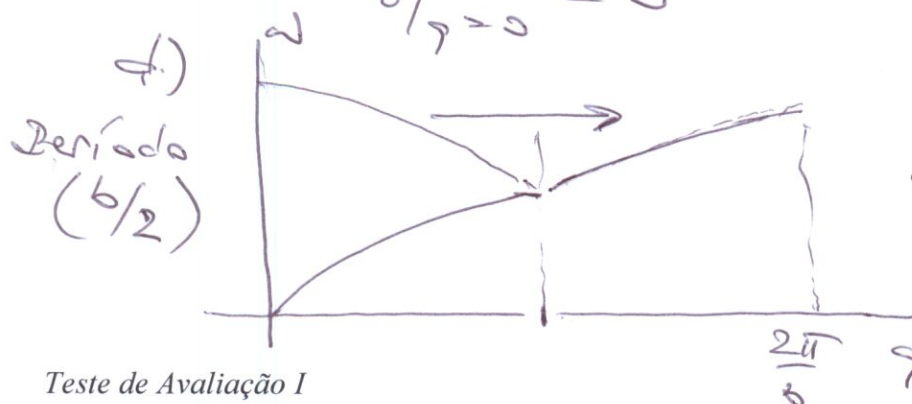
$$\omega^2 \approx \frac{\omega_1^2 \omega_2^2}{\omega_1^2 + \omega_2^2} \sin^2\left(\frac{qb}{2}\right) \approx \frac{\omega_1^2 \omega_2^2}{\omega_1^2 + \omega_2^2} \left(\frac{qb}{2}\right)^2$$

$$v = \frac{d\omega}{dq} \Big|_{q=0} = \frac{\omega_1 \omega_2}{\sqrt{\omega_1^2 + \omega_2^2}} \cdot b$$

Ramo óptico, $q \rightarrow 0$

$$\omega^2 \approx \omega_1^2 + \omega_2^2 - \frac{\omega_1^2 \omega_2^2}{\omega_1^2 + \omega_2^2} \sin^2\left(\frac{qb}{2}\right)$$

$$v \Big|_{q=0} = 0$$



$$\begin{aligned} M_1 &= M_2 \\ \omega_1^2 &= \omega_2^2 \equiv \omega_0^2 \\ \omega^2 &= \omega_0^2 \pm \sqrt{\omega_0^4 \cos^2\left(\frac{qb}{2}\right)} \\ &= 2\omega_0^2 \sin^2\left(\frac{qb}{4}\right) \end{aligned}$$

2) (3v) É possível usar electrões em vez de raios X para obter difractogramas dos cristais. Considere um feixe de electrões com a energia cinética de 1 keV, a incidir numa folha metálica, policristalina. O metal tem a estrutura cúbica de corpo centrado com a constante da rede $a = 5.02 \text{ \AA}$.

a) Calcule o comprimento de onda de de Broglie.

b) Calcule o ângulo de Bragg θ para o primeiro máximo de difracção.

$$\frac{p^2}{2m_0} = E = 1 \text{ keV} = 1.6 \cdot 10^{-16} \text{ J}$$

$$p = \sqrt{2m_0 E} ; \quad k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_0 E}$$

$$= \frac{1}{1.05 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}} \sqrt{2 \cdot 9.1 \cdot 10^{-31} \text{ kg} \cdot 1.6 \cdot 10^{-16} \text{ J}} = 1.7 \cdot 10^{11} \text{ m}^{-1}$$

$$a) \quad \lambda = \frac{2\pi}{k} = 3.7 \cdot 10^{-11} \text{ m}$$

$$b) \quad n\lambda = 2d \sin \theta \rightarrow \sin \theta_1 = \frac{\lambda}{2d}$$

$$\theta_1 \approx \sin \theta_1 = 3.7 \cdot 10^{-2} ; \quad \theta_1 \approx 2^\circ$$

3) (3v) Difracção de neutrões pode ser usada para medir as curvas de dispersão de fonões, $\omega(q)$, nos cristais. Nesta técnica, os neutrões incidem num cristal, interagem ("colidem") com os fonões e ficam deflectidos.


a) Escreva as relações de conservação do momento e da energia nos processos com criação e destruição de um fonão..

b) Diga o que é preciso medir experimentalmente para obter $\omega(q)$.

$$a) \quad \frac{p^2}{2m} - \frac{p'^2}{2m} = \pm \hbar \omega(\vec{q})$$

$$\vec{p} - \vec{p}' = \pm \hbar \vec{q}$$

(ângulos de deflexão pequenos)

b)  Fixar \vec{p} e medir \vec{p}' (direção e módulo), i.e. medir o ângulo θ e a energia dos neutrões deflectidos..

4) (2v) Quais são os principais tipos de ligação química nos sólidos cristalinos? Dê exemplos de materiais e os valores típicos da energia de coesão por átomo para cada um destes tipos de ligação.

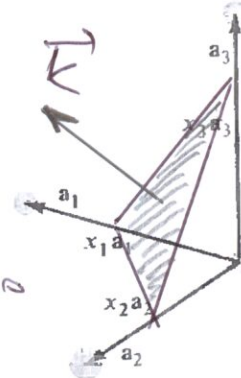
- iónica (NaCl, KCl), ~ 1 eV por par
- covalente (C, Si, GaAs), " " "
- metálica (Na, Ag), ~ 1 eV por átomo
- van der Waals (Ne, Ar), ~ 0.1 eV/átomo

5) (3v) A figura ao lado apresenta um plano cristalino numa rede cúbica. Os segmentos designados na figura são: $x_1=2$, $x_2=2$, $x_3=4$.

a) Quais são os índices de Miller deste plano?

b) Qual é a distância entre os planos paralelos mais próximos desta família se a constante da rede é 1 \AA ?

c) Qual é o menor comprimento de um vector da rede recíproca com estes índices de Miller? Desenhe este vector na figura.



$$a) h:k:l = \frac{1}{2} : \frac{1}{2} : \frac{1}{4}$$

$$(hkl) = (221)$$

$$b) d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} = \frac{1}{\sqrt{2^2 + 2^2 + 1^2}} = \frac{1}{3} = 0.33 \text{ \AA}$$

c) $\vec{K} \perp$ ao plano cristalino, $\parallel (221)$

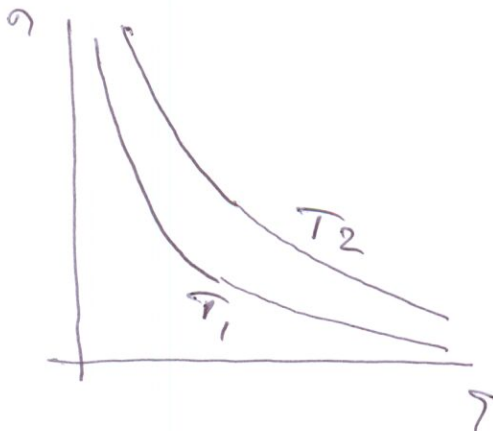
$$K_{\min} = \frac{2\pi}{d} = \frac{6\pi}{1} = 6\pi \text{ \AA}^{-1}$$

6) (2v) Trace um gráfico qualitativo para a função de Bose-Einstein para fónons acústicos longitudinais com vectores de onda (q) pequenos em função de q para duas temperaturas diferentes, $T_1 < T_2$.

$$n(\omega) = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1}$$

$$\hbar\omega(q) = \hbar s_l q; \quad s_l - \text{velocidade do som longitudinal}$$

$$n(q) = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar s_l q}{k_B T}\right) - 1} \approx \frac{1}{\frac{\hbar s_l q}{k_B T}}$$



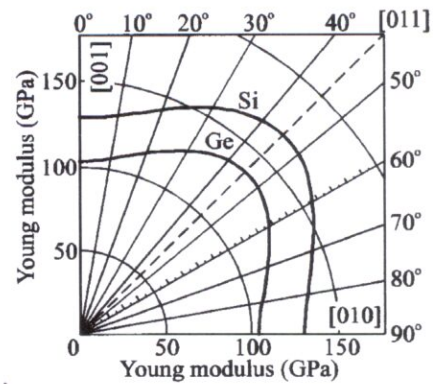
$$T_2 > T_1$$

7) (3v) Utilizando os dados da figura e da tabela em baixo, compare as velocidades de ondas elásticas longitudinais em barras de silício e de germânio se o eixo de cada barra é dirigido

a) segundo direcção (100);

b) segundo direcção (110).

	Si	Ge
Constante da rede, Å°	5,43	5,66
Massa atómica, u. a.	28	72



A velocidade da onda:

$$S_L = \sqrt{Y/\rho}$$

$$\rho = \frac{M}{a^3}; \quad M - \text{massa atómica}$$

$$\frac{S_L^{(Si)}}{S_L^{(Ge)}} = \sqrt{\frac{Y_{Si}}{Y_{Ge}} \left(\frac{a_{Si}}{a_{Ge}}\right)^3 \frac{M_{Ge}}{M_{Si}}}$$

a) segundo (100) $\frac{Y_{Si}}{Y_{Ge}} \approx 1.3$

$$\frac{S_L^{(Si)}}{S_L^{(Ge)}} \approx 1.71$$

b) segundo (110) $\frac{Y_{Si}}{Y_{Ge}} \approx 1.26$

$$\frac{S_L^{(Si)}}{S_L^{(Ge)}} \approx 1.69$$