

FÍSICA DA MATÉRIA CONDENSADA

Problemas - 2ª Série

1. Considere um átomo de hidrogênio representado por uma esfera de raio a_0 com densidade de carga uniforme.
 - (a) Determine o factor de forma atômico.
 - (b) Como depende o factor de forma do ângulo de difracção?
 - (c) Indique para uma orbital do tipo p qual seria a dependência com o ângulo de difracção e mostre que, se numa amostra todas as orientações forem possíveis para esta orbital se cai de novo no caso isotrópico.
2. Qual é o factor de estrutura geométrico em termos de (hkl) para uma célula unitária de faces centradas. Quais são os planos que não reflectem raios X?
3. Mostre que as reflexões pelos planos $(n00)$ do germânio (estrutura do diamante) se anulam excepto para n múltiplo de 4. O peso atômico é 72 e a densidade 5.3gcm^{-3} . Qual é o máximo λ para o qual podemos ter uma reflexão pelos planos (400) ?
4. Quais são as condições análogas à condição $\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f = \text{vector da rede recíproca}$, para a difusão coerente (difracção) em 1d e 2d?
5. Para um cristal monoatômico unidimensional, com N átomos separados pela distância a , prove que a intensidade da radiação difundida correspondente aos vectores \mathbf{k}_i e \mathbf{k}_f , é

$$\frac{\sin^2 \frac{1}{2} N(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f) \cdot \mathbf{a}}{\sin^2 \frac{1}{2} (\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f) \cdot \mathbf{a}}$$

Para um dado \mathbf{k}_i , mostre que reflexões brilhantes são observadas para $(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f) \cdot \mathbf{a} = 2M\pi$. Calcule a intensidade das reflexões para N grande, mas finito.

6. Pós de três amostras cúbicas foram analisados pelo método de Debye. Uma é fcc, outra bcc e a terceira tem a estrutura do diamante. As posições aproximadas dos quatro primeiros anéis de difracção são respectivamente:

A: 42.2, 49.2, 72.0, 87.3

B: 28.8, 41.0, 50.8, 59.6

C: 42.8, 73.2, 89.0, 115.0

onde o ângulo entre os vectores incidente e difractado é dado em graus.

- (a) Identifique as estruturas cristalinas A, B e C.
- (b) Se os raios-X incidentes tiverem um comprimento de onda de $1.5A$ quais são os comprimentos das células cúbicas convencionais?
- (c) Desenhe os planos de Bragg no espaço real para a estrutura A.
- (d) Se a estrutura do diamante for trocada pela do ZnS (zincblende) o que acontece ao padrão de difracção ?

7. Numa experiência de difracção, usando o método dos pós, um cristal tetragonal centrado é analisado com raios X de comprimento de onda 1.54Å .
- Admitindo que o cristal é monoatômico e que a célula unitária tem uma base de aresta 3.1Å e altura 4.5Å , determine os ângulos para os quais se obtêm os três primeiros anéis de difracção.
 - Se a rede for uma rede tetragonal com um motivo de dois átomos diferentes, A em 000 e B em $\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}$, diga qual é a posição das três primeiras intensidades de difracção não nulas e qual a relação entre essas intensidades.
8. Considere uma transformação de Fe_α (bcc) para Fe_γ (fcc), interpretando os átomos de Fe como esferas rígidas de raio igual ao raio iónico (1.68Å).
- Calcule as densidades das duas estruturas.
 - Indique as redes recíprocas.
 - Esquematize os diagramas de pós para as duas estruturas.
 - Sugira um método experimental para medir a temperatura de transição.
9. O cloreto de cézio tem uma estrutura cúbica simples com parâmetro $a = 4.19\text{Å}$. O motivo tem um ião de cézio na origem e um de cloro em $\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}$.
- Calcule os vectores primitivos da rede recíproca.
 - Escreva em termos desses vectores o vector da rede recíproca que corresponde a planos cristalinos com índices de Miller (210) .
 - Use a construção da rede recíproca para determinar o ângulo a que a radiação de comprimento de onda de 3.14Å sofre uma reflexão de Bragg, pelos planos (210) . Qual é o ângulo entre o feixe incidente e a face (100) do cristal? (Suponha que a difusão tem lugar no plano (001)).
 - Use o resultado da alínea (b) para escrever a distância entre os planos (210) e assim verifique directamente a lei de Bragg: $2d \sin \theta = n\lambda$.
 - Calcule todos os ângulos de difracção possíveis para neutrões com $\lambda = 3.14\text{Å}$.
 - Calcule as intensidades relativas dos feixes difractados.