

$$1. a) \rho = \frac{4}{a^3} (m_{Na} + m_{Cl})$$

$$= \frac{4 (23 + 35,5) m_0 Na}{5,63 \times 10^{-30}} \quad (SI)$$

Na # Arogado

$$m_0 = 1 \text{ u.m.a.}$$

b) (111) densidade superficial maior, e portanto distância interplanar maior. Logo as forças interplanares são menores, o que facilita a divergência.

c) Factor de Estrutura

Átomos de Na em (000) $(\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0)$ $(\frac{1}{2} 0 \frac{1}{2})$ $(0 \frac{1}{2} \frac{1}{2})$

Átomo de Cl em $(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2})$ $(00 \frac{1}{2})$ $(0 \frac{1}{2} 0)$ $(\frac{1}{2} 00)$

$$F = f_{Na} \left[1 + e^{-i\pi(h+k)} + e^{-i\pi(h+l)} + e^{-i\pi(k+l)} \right] + f_{Cl} e^{-i\pi(h+k+l)} \left[1 + e^{i\pi(h+k)} + e^{i\pi(h+l)} + e^{i\pi(k+l)} \right]$$

• Reflexão (100)

$$F = f_{Na} \left[1 + e^{-i\pi} + e^{-i\pi} + 1 \right] + f_{Cl} e^{-i\pi} \left[1 + e^{i\pi} + e^{i\pi} + 1 \right] \\ = 0 + 0 = 0 \quad \text{Nula!}$$

• Reflexão (200)

$$F = f_{Na} \left[1 + e^{-i2\pi} + e^{-i2\pi} + 1 \right] + f_{Cl} \left[1 + e^{i2\pi} + e^{i2\pi} + 1 \right] \\ = 4 (f_{Na} + f_{Cl})$$

• Reflexão (111)

$$F = f_{Na} (1 + 1 + 1 + 1) - f_{Cl} (1 + 1 + 1 + 1) \\ = 4 (f_{Na} - f_{Cl})$$

• Reflexão (222)

$$F = f_{Na} (1+1+1+1) + f_{Cl} (1+1+1+1) \\ = 4(f_{Na} + f_{Cl})$$

d) Intensidades.

(100)	(111)	(200)	(222)
6 planos 3 orientações	8 planos 4 orientações	6 planos	8 planos.

Os factores de forma decrescem da esquerda para a direita, mas são \approx constantes para baixos ângulos.

O factor de estrutura

$$F_{100} = 0$$

$$F_{111} \propto 4 \times 6$$

$$F_{200} \propto 4 \times 28$$

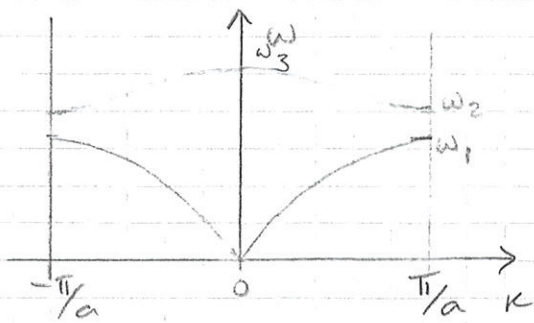
$$F_{222} \propto 4 \times 28$$

$F \times$ multiplicidade

$$F_{222} > F_{200} > F_{111} > F_{100}$$

Se o factor de forma variar mais do que $\frac{3}{4}$ para os ângulos correspondente às reflexões 200 e 222 a intensidade relativa das duas primeiras riscas seria invertida.

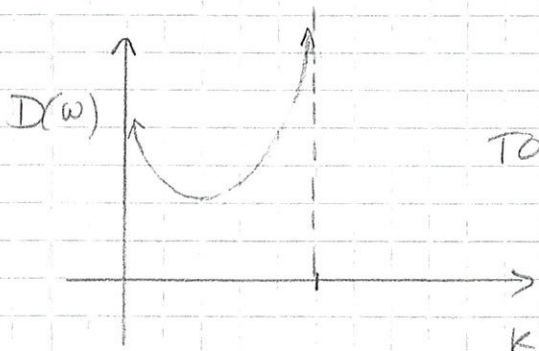
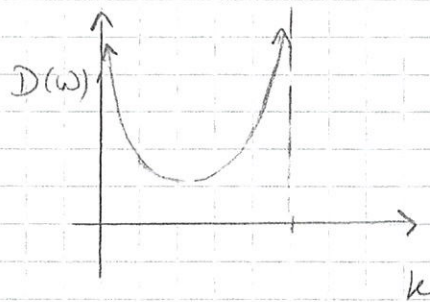
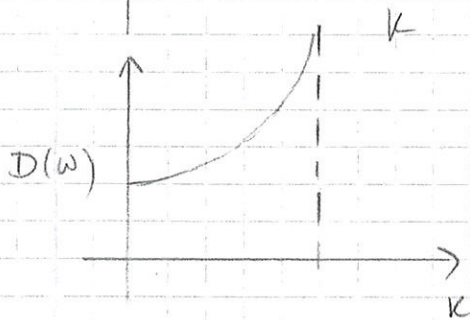
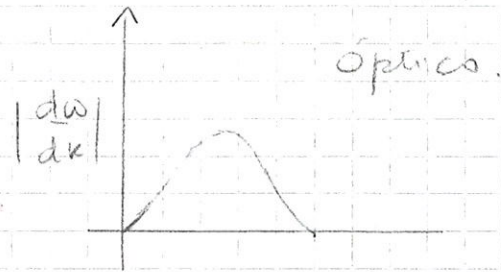
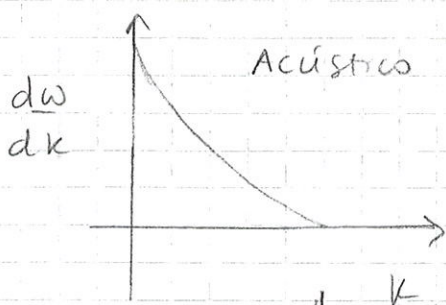
2,



Para cada modo,

$$D(\omega) = \frac{L}{\pi} \frac{1}{\left| \frac{d\omega}{dk} \right|}$$

$D(\omega)$ diverge quando $\frac{d\omega}{dk} = 0$.



Total: acústico + óptico.

X Modos de bordos: $\omega_1 < \omega < \omega_2$, $\omega > \omega_3$

Req. de movimento: $e^{\pm \alpha x} e^{i\omega t}$

$e^{\pm \alpha x}$ exponencial amortecida.

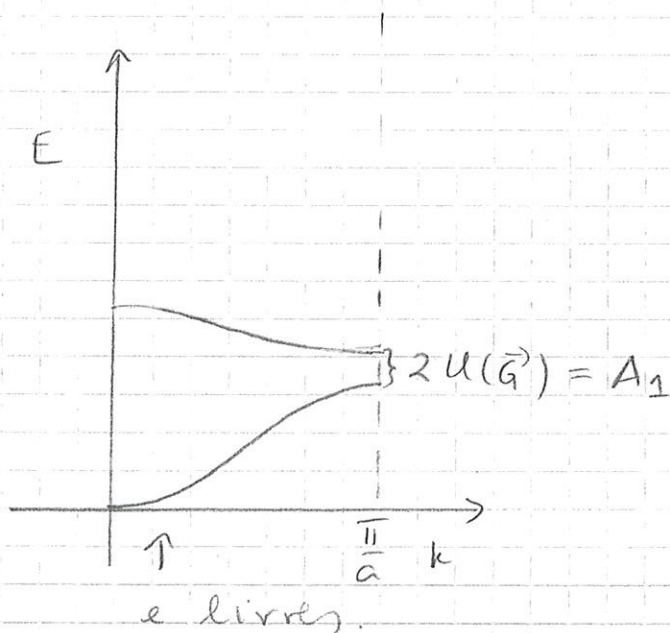
3. a) Reflexão de ondas planas com k perto da fronteira da zona, da origem a ondas estacionárias com densidade de carga máxima localizada perto dos mínimos ou dos máximos do potencial iônico.

Este processo tem como consequência a existência de hiato na relação de dispersão eletrônica, $E(k)$.

Se o potencial químico a $T=0$ estiver temos um isolante se $E_g > 2eV$ e um semicondutor se $E_g \leq 2eV$.

Se o potencial químico a $T=0$ estiver numa banda/bandas temos um metal.

b)



c) # elétrons de valência por e ausência de sobreposição de bandas.

$$4. a) E_F = E(k_F) = \frac{1}{2m} \hbar^2 k_F^2$$
$$k_F = (3\pi^2 n_e)^{1/3}$$

$$E_F = 5.5 \text{ eV.}$$

$$b) v_F = 1.39 \times 10^8 \text{ cm s}^{-1}$$

$$c) T_F = 63800 \text{ K.}$$

$$C_{V(e)} = \frac{\pi^2}{6} \frac{kT}{E_F} N$$

d) Fônões: muito clássicos.

$$C_V(\text{fônões}) = \frac{3}{2} k_B N$$

$$C_V(\text{total}) = C_V(e) + C_V(\text{fônões})$$

$$C_V(e) / C_V(\text{total}) = \frac{1}{1 + C_V(\text{fônões}) / C_V(e)}$$