1. a) • Ondas planas monocromáticas
⇒ Cond. de difracção igual p. o mesmo λ (dispersão elástica)
• Relação entre E e p diferente
• Poder / de penetração diferente

e < raios X < neutrões

b) Textbook.

c) E_n térmicos é da ordem da(s) energia(s) dos fonões.
Processos de absorção ou emissão de fonões pela rede / mais prováveis ⇒ dispersão inelástica

d) $E'_n = E_n \pm \hbar\omega$ (cons. E)

$\Delta \vec{s} = \pm \vec{q} + \vec{G}$ (cons. momento cristalino)

2. a)

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

e $(\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4})$ $(\frac{3}{4}\frac{3}{4}\frac{1}{4})$ $(\frac{3}{4}\frac{1}{4}\frac{3}{4})$ $(\frac{1}{4}\frac{3}{4}\frac{3}{4})$

Factor de estrutura

$$F = f_{Si}\left\{\left[1 + e^{-i\pi(h+k)} + e^{-i\pi(h+l)} + e^{-i\pi(k+l)}\right] + e^{-\frac{i\pi}{2}(h+k+l)}\left[1 + e^{-i\pi(h+k)} + e^{-i\pi(h+l)} + e^{-i\pi(k+l)}\right]\right\}$$

$$= f_{Si}\left[1 + e^{-i\pi(h+k)} + e^{-i\pi(h+l)} + e^{-i\pi(k+l)}\right] \times \left[1 + e^{-\frac{i\pi}{2}(h+k+l)}\right]$$ ✓

$F=0$ quando

$F_{fcc} = 1 + e^{-i\pi(h+k)} + e^{-i\pi(h+l)} + e^{-i\pi(k+l)} = 0$ rede

ou $1 + e^{-\frac{i\pi}{2}(h+k+l)} = 0.$ motivo.

$F_{fcc} = 0$, quando a paridade de hkl não é a mesma

eg. (210) (211)

b) $1 + e^{-\frac{i\pi}{2}(6)} = 1 - 1 = 0.$ ✓

$\frac{1}{2}(h+k+l)$ = inteiro ímpar

$\frac{1}{2}(h+k+l) = 1$ (200)

$\frac{1}{2}(h+k+l) = 3$ (222) (240)

$\frac{1}{2}(h+k+l) = 5$ (442)

c) Átomos estão em estados electrónicos diferentes.

d) Zinc blend F_{rede} igual

F_{motivo} diferente

alínea a) ñ muda

b) muda e é $\neq 0$ p. $\frac{1}{2}(h+k+l)$ impar

3. $E = \frac{1}{2} M \sum_s \dot{u}_s^2 + \frac{1}{2} C \sum_s (u_s - u_{s+1})^2$ N átomos.

c) $K = \sum_s \frac{1}{2} M \omega^2 u_0^2 \sin^2(\omega t - ska)$

A média temporal é

$$\langle \sin^2(\omega t - ska) \rangle = \frac{1}{2}$$

e $\langle K \rangle = \frac{1}{4} M \omega^2 u_0^2$

$$U = \frac{1}{2} C u_0^2 \sum_s \left[\cos(\omega t - ska) - \cos(\omega t - ska - ka) \right]^2$$

Seja, $\omega t - ska = x$

$\cos(x - ka) = \cos x \cos ka + \sin x \sin ka$

$$\langle U \rangle = \frac{1}{2} C u_0^2 \Big[\langle \cos^2 x \rangle (1-\cos ka)^2 +$$

$$\langle \sin^2 x \rangle \sin^2 ka - 2 \langle \sin x \cos x \rangle (1-\cos ka) \sin ka \Big]$$

$$= \frac{1}{2} C u_0^2 \left[\frac{1}{2} (1-\cos ka)^2 + \frac{1}{2} \sin^2 ka - 0 \right]$$

$$= \frac{1}{2} C u_0^2 (1 - \cos ka) = \frac{1}{4} M \omega^2 u_0^2$$

Rel. dispersão: $M\omega^2 = 2C(1-\cos ka)$ $\quad C(1-\cos ka) = \frac{M\omega^2}{2}$

(+ simples $\langle K \rangle = \langle U \rangle$)

Energia média total

d) $\langle E \rangle = \frac{1}{2} M \omega^2 u_0^2$

$$\left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega = N \frac{1}{2} M \omega^2 u_0^2$$

ie $\quad n \simeq \frac{1}{2} N \frac{M \omega u_0^2}{\hbar}$

r.m.s. $\quad \frac{u_0}{\sqrt{2}} = 1 \text{ Å}$

: ∴ Επίσης $u_0^2 = 2\,\mathring{A}^2$

$M_{at.} = 27 \times 1{,}66 \times 10^{-24}\,g.$

$\rho = 2{,}7\,g\,cm^{-3}.$

$N = \frac{M_T}{M_{at}} = \frac{2{,}7}{27 \times 1{,}66 \times 10^{-24}}$

$\hbar = 10^{-27}\,erg\,s.$

$\omega = 2\pi \times 10^{8}\,rad\,s^{-1}$

$n \approx 1{,}607 \times 10^{20}.$

4. Textbook.