

FÍSICA DA MATÉRIA CONDENSADA

Problemas - 1^a Série

Conceitos introdutorios

1. Considere uma rede oblíqua em duas dimensões. Mostre usando um diagrama que o vector $(2,3)$ pode ser usado como um dos vectores primitivos da rede espacial. Compare a área da malha definida por esses vectores com a área da malha definida pelos vectores $(1,0)$ e $(0,1)$. Comente.
2. Dada a rede bidimensional com vectores de translacção (\mathbf{a}, \mathbf{b}) quais dos seguintes vectores dão origem à mesma rede:
 - (a) $(2\mathbf{a}, \mathbf{b})$
 - (b) $(\mathbf{a}/2, \mathbf{b})$
 - (c) $(\mathbf{a} + \mathbf{b}, \mathbf{a} - \mathbf{b})$
 - (d) $((\mathbf{a} + \mathbf{b})/2, (\mathbf{a} - \mathbf{b})/2)$
 - (e) $(\mathbf{a} + 6\mathbf{b}, \mathbf{b})$
 - (f) $(3\mathbf{a} + 5\mathbf{b}, \mathbf{a} + 2\mathbf{b})$
3. Mostre que os eixos de rotação de grau 5 e 7 são incompatíveis com a simetria de translacção.
4. A célula unitária de uma rede bidimensional tem $a=b$ e os vectores fazem um ângulo de 120° entre si. Disponha três átomos à volta de cada ponto da rede de forma a que o cristal tenha as seguintes simetrias: (a) 6 mm (b) 3 (c) 2 mm (d) 2 e (e) 1.

Grupo 1: Redes e estruturas

5. A rede bidimensional em favo de mel é uma rede de Bravais? Se não for, descreva-a como uma rede de Bravais com motivo.
6. Considere uma rede cúbica centrada com todos os átomos idênticos. Quais são os vectores de translação primitivos? Adicione agora átomos idênticos aos primeiros nos centros das faces e das arestas de cada cubo. Que tipo de estrutura obtém?
7. Mostre geometricamente que a estrutura tetragonal de faces centradas é equivalente a uma estrutura tetragonal centrada. Explique a diferença entre a estrutura cúbica centrada e a estrutura cúbica de faces centradas.
8. Em cada um dos casos seguintes indique se a estrutura é uma rede de Bravais. Se for, indique três vectores primitivos; se não for, descreva-a como uma rede de Bravais com o menor motivo possível.
 - (a) Cúbica de bases centradas.

- (b) Cúbica de lados centrados.
- (c) Cúbica de arestas centradas.

Grupo 2: Estruturas

9. Descreva a estrutura hexagonal de empilhamento denso e a rede fcc como o empilhamento de planos hexagonais densos. Explique porque é que a primeira é uma estrutura cristalina e a segunda é uma rede de Bravais.
10. Mostre que há duas estruturas possíveis para o empilhamento máximo de esferas: fcc e hcp. Calcule a razão c/a ideal para o caso hexagonal.
11. Para cada uma das estruturas que a seguir se indicam (cúbica simples, bcc, fcc, diamante, hexagonal compacta) calcule:
 - (a) a densidade volúmica
 - (b) o número de primeiros vizinhos e a distância entre primeiros vizinhos
 - (c) o número de segundos vizinhos e a distância entre segundos vizinhos
 - (d) a fracção máxima de volume preenchido, substituindo os pontos da rede por esferas rígidas de raio máximo.
12. O NaCl tem uma estrutura fcc com célula unitária cúbica de lado $a = 5.63\text{Å}$. O motivo desta estrutura é constituído por um átomo de sódio ($m = 23a.m.u.$) em $(0,0,0)$ e um átomo de cloro ($m = 35.5a.m.u.$) em $(1/2,1/2,1/2)$. Calcule a densidade do composto e as densidades superficiais nos planos $\{100\}$ e $\{111\}$.
13. O Na sofre uma transformação estrutural de bcc para hcp a $23K$. Supondo que a densidade se mantém constante durante a transformação, calcule a constante a na fase hexagonal, dado que $a = 4.23\text{Å}$ na fase cúbica e que a razão c/a é ideal.

Grupo 3: Planos e índices de Miller

14. Desenhe esquematicamente um plano (110) e (111) numa célula cúbica unitária. Num cristal cúbico quantos planos equivalentes $\{100\}$, $\{110\}$ e $\{111\}$ existem ?
15. Calcule os índices da direcção comum aos planos (111) , (231) e $(\bar{1}24)$. Qual é o ângulo entre esta direcção e $[111]$? Considere que o cristal é cúbico.
16. Mostre que a distância entre planos (hkl) da estrutura cúbica simples de lado a é $d^2 = a^2/(h^2 + k^2 + l^2)$.
17. Quais são os planos cristalográficos mais afastados de um cristal (a) fcc e (b) bcc ?
18. Quais são os índices das faces dos octaedros regulares na estrutura da perovskite ?

Grupo 4: Rede recíproca

19. Calcule a rede recíproca de uma rede bcc com vectores primitivos $\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}(\mathbf{j} + \mathbf{k} - \mathbf{i})$, $\mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(\mathbf{i} + \mathbf{k} - \mathbf{j})$, $\mathbf{a}_3 = \frac{a}{2}(\mathbf{i} + \mathbf{j} - \mathbf{k})$. Mostre que esta rede é fcc. Compare as direcções dadas pelos mesmos índices nas duas redes.
20. Calcule a rede recíproca da rede hexagonal com vectores primitivos $\mathbf{a}_1 = a\mathbf{i}$, $\mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}\mathbf{i} + \frac{\sqrt{3}}{2}a\mathbf{j}$, $\mathbf{a}_3 = c\mathbf{k}$. Mostre que esta rede é também hexagonal. Compare as direcções dadas pelos mesmos índices nas duas redes.
21. Determine a rede recíproca de uma rede de Bravais do tipo:
- ortorrômbica de faces centradas
 - ortorrômbica de bases centradas
22. Considere uma estrutura ortorrômbica de corpo centrado.
- Defina uma célula primitiva para esta rede.
 - Determine a fracção máxima de espaço ocupado considerando os átomos substituídos por esferas rígidas num regime de empilhamento máximo.
 - Calcule a rede recíproca desta rede.
 - Mostre que no limite em que b e c tendem para a , os resultados das alíneas anteriores tendem para os resultados correspondentes de uma rede cúbica.
23. Dada uma rede de Bravais com vectores primitivos \mathbf{a} , \mathbf{b} e \mathbf{c} , mostre que um conjunto alternativo de vectores primitivos é $(\mathbf{a} + 6\mathbf{b}, \mathbf{b} + 7\mathbf{c}, \mathbf{c})$. Mostre que a rede recíproca é a mesma para os dois conjuntos de vectores.
24. Mostre que a recíproca da rede recíproca, é a rede original.
25. Mostre que o volume da célula unitária da rede recíproca é $V = 8\pi^3/v$, onde v é o volume da célula unitária da rede directa.
26. A rede de Bravais gerada por três vectores primitivos de módulo a , fazendo um ângulo θ entre si chama-se trigonal. Mostre que a rede recíproca é também trigonal com ângulo θ^* dado por

$$-\cos \theta^* = \cos \theta / (1 + \cos \theta)$$