FÍSICA DA MATÉRIA CONDENSADA

Problemas - 1ª Série

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. A rede bidimensional em favo de mel é uma rede de Bravais? Se não for, descreva-a como uma rede de Bravais com motivo.

4. Mostre que os eixos de rotação de grau 5 e 7 são incompatíveis com a simetria de translacção.

5. 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 ?

6. 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.

7. 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 possivel.

   (a) Cúbica de bases centradas.

   (b) Cúbica de lados centrados.

   (c) Cúbica de arestas centradas.

8. A célula unitária de uma rede bidimensional tem a=b e os vectores fazem um ângulo de 120^o 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.

9. 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.

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. Desenhe esquematicamente um plano (110) e (111) numa célula cúbica unitária. Num cristal cúbico quantos planos equivalentes {100}, {110} e {111} existem ?

12. Calcule os índices da direcção comum aos planos (111), (231) e $(1\bar{2}4)$. Qual é o ângulo entre esta direcção e [111] ? Considere que o cristal é cúbico.

13. Quais são os planos cristalográficos mais afastados de um cristal (a) fcc e (b) bcc ?

14. Quais são os índices das faces dos octaedros regulares na estrutura da perovskite ?

15. Mostre que a distância entre planos (hkl) da estrutura cúbica simples de lado a é $d^2 = a^2/(h^2 + k^2 + l^2)$.

16. O NaCl tem uma estrutura fcc com célula unitária cúbica de lado $a = 5.63A$. O motivo desta estrutura é constituido 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}.

17. 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 $a = 4.23A$ na fase cúbica e que a razão c/a é ideal.

18. Calcule a rede reciproca 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.

19. 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.

20. Determine a rede recíproca de uma rede de Bravais do tipo:

   (a) ortorrômbica de faces centradas

   (b) ortorrômbica de bases centradas

21. Considere uma estrutura ortorrômbica de corpo centrado.

   (a) Defina uma célula primitiva para esta rede.

(b) Determine a fracção máxima de espaço ocupado considerando os átomos substituidos por esferas rígidas num regime de empilhamento máximo.

(c) Calcule a rede recíproca desta rede.

(d) 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.

22. 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.

23. Mostre que a recíproca da rede recíproca, é a rede original.

24. 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.

25. 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

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

26. 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.