4.1 Um feixe de electrões com uma energia de 59.32 keV incide num mono-cristal de silício. A estrutura é diamante: rede fcc com constante de rede $a = 5.43$ Å e dois átomos por célula primitiva em $(0,0,0)$ e $\frac{1}{4}(a,a,a)$.

a) Determine os mais curtos vectores $\vec{G}$ de rede recíproca, escrevendo-os sob a forma $\frac{2\pi}{a}(h,k,l)$.

b) Determine os quatro menores ângulos de difração (2θ).

c) Supondo que a densidade de electrões é uma soma de densidades de carga atómicas, mostre que não vai ser observado o pico de difracção correspondente a $\frac{2\pi}{a}(2,0,0)$.

4.2 Na equação de Scrödinger para **electrões** na aproximação de os núcleos estarem parados (limite da aproximação adiabática) aparecem as constantes de Planck,

$$\hbar \simeq 1.0546 \times 10^{-34} \text{ J s},$$

a massa do electrão,

$$m_e \simeq 9.1094 \times 10^{-31} \text{ kg},$$

e finalmente a constante de acoplamento electromagnético,

$$\frac{|e|^2}{4\pi\varepsilon_0} \simeq 2.3071 \times 10^{-28} \text{ J m},$$

o que quer dizer que qualquer grandeza que se possa calcular a partir da equação de Scrödinger para electrões, tem que aparecer como um número multiplicado pela combinação destas constantes que tenha a dimensão adequada.

a) Calcule a combinação das constantes que dá uma velocidade. Compare com a velocidade da luz.

b) Calcule a combinação das constantes que dá uma energia. Compare com a energia de ligação do átomo de hidrogénio.

c) Calcule a combinação das constantes que dá uma distância. Compare com o raio de Bohr.

d) Calcule a combinação das constantes que dá uma constante de mola.

4.3 Vamos fazer uma estimativa da frequência (angular) de vibração dos átomos nos cristais. A massa dos núcleos é aproximadamente o número de massa atómico A vezes a massa de um nucleão,

$$M \simeq 1.67 \times 10^{-27} \text{ kg}.$$

Faça um modelo simples usando a constante de mola estimada na última alínea do problema anterior, e obtenha uma expressão para a estimativa da frequência de vibração $\omega(A)$. Obtenha valores para o hidrogénio, o silício e o chumbo. Converta esses valores em temperatura equivalente.

Problemas numéricos para fazer em casa

4.4 Considere três blocos com massas idênticas M deslizando sem fricção na direcção x sobre uma superfície horizontal (rodas sobre carris seriam uma boa aproximação). As massas estão ligadas por duas molas com a mesma constante de mola k.

a) Escreva as equações do movimento. Mostre que a translação uniforme é uma solução das equações. Encontre a solução geral das equações do movimento.

b) Escreva as equações do movimento em unidades naturais do problema. Apresente três gráficos da posição das 3 massas em função do tempo obtidas por integração numérica dessas equações. Para o primeiro caso escolha condições iniciais "ao acaso", para os outros dois gráficos escolha condições iniciais de modo a evidenciar os modos próprios de vibração.

4.5 Generalizando o problema anterior considere 20 blocos de massas idênticas M deslizando sem fricção na direcção x sobre uma superfície horizontal, e ligadas por $20 - 1$ molas idênticas. Inicialmente as massas estão paradas, $u_n'(0) = 0$ mas estão deslocadas aleatóriamente da sua posição de equilíbrio, $u_n(0) = 0.2 \times r$ onde r é um número aleatório com probabilidade uniforme entre -0.5 e 0.5. Inicie o pseudo-random number generator com o seu número mecanográfico, por exemplo `SeedRandom[12345]` no Mathematica.

a) Escreva e integre numericamente as equações do movimento. Mostre o gráfico da posição de 3 massas à sua escolha em função do tempo.

b) Use a série de Fourier, ou mais precisamente a transformada de Fourier rápida para identificar as frequências presentes no movimento de uma dessas massas. Para a série ser calculada rapidamente, a amostragem das posições em função do tempo deve ter como comprimento uma potência de 2 (isto é 2^m).

c) Para a terceira frequência mais baixa que encontrou, ω_3, "filtre" as transformadas das posições de todas as massas em função do tempo para eliminar as outras frequências. Volte a usar Fourier para obter as posições "filtradas", por outras palavras a componente a essa frequência ω_3 da posição das massas. Tente obter uma estimativa do respectivo comprimento de onda. Note que tem de filtrar ω e $-\omega$ para que a trajectória filtrada seja real.

d) Compare o resultado da alínea anterior, ω_3 e k_3, com o previsto para a cadeia infinita.