

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 $a = 5.43 \text{ \AA}$ e dois átomos por célula primitiva em $(0, 0, 0)$ e $\frac{1}{4}(a, a, a)$.

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

$$\frac{|e|^2}{4\pi\epsilon_0} \simeq 2.3071 \times 10^{-28} \text{ J m},$$

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.

- Calcule a combinação das constantes que dá uma velocidade. Compare com a velocidade da luz.
- Calcule a combinação das constantes que dá uma energia. Compare com a energia de ligação do átomo de hidrogénio.
- Calcule a combinação das constantes que dá uma distância. Compare com o raio de Bohr.
- Calcule a combinação das constantes que dá uma constante de mola.

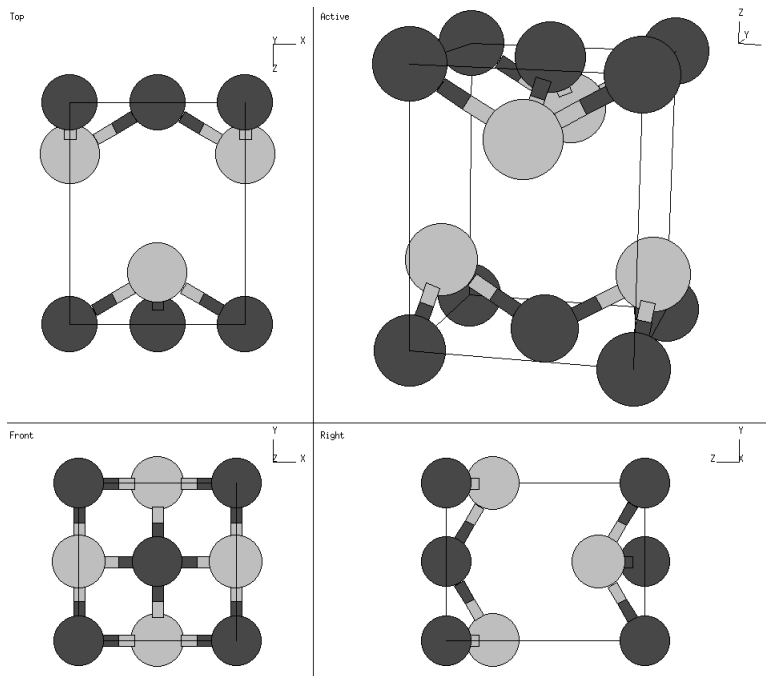
4.3 Vamos fazer uma estimativa da frequência (angular) de vibração dos átomos nos cristais. A massa dos núcleos é aproximadamente o número de massa atómico A vezes a massa de um nucleão,

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

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.

4.4 A figura em baixo mostra a célula tetragonal convencional do óxido de chumbo, PbO , em perspectiva e em três projecções em direcções ortogonais. Os átomos escuros indicam o oxigénio e os átomos claros o chumbo. A aresta do quadrado da base do prisma tetragonal mede $a = 4.000 \text{ \AA}$, e a altura do prisma é $c = 5.065 \text{ \AA}$. A altura dos átomos de chumbo é de $0.23c$ e $(1 - 0.23)c$.

Este cristal foi analisado por difracção com um feixe de neutrões com a energia de 0.400 eV .



- Identifique a rede deste cristal. Qual é a base? Indique a posição dos átomos que escolheu para a base.
- Qual é o comprimento de onda da radiação?
- Calcule os cinco menores ângulos de difracção (2θ) que vão ser observados.
- Dos picos de difracção que vão ser observados, pode-se prever que há alguns que vão ter uma intensidade fraca. Encontre alguns exemplos.