

Introdução à Física do Estado Sólido

Física Moderna II-B

Caetano R. Miranda

AULA 9 – 22/09/2022

Carlos A. Martins Jr.



sampa



crmiranda@usp.br

Cronograma

CRONOGRAMA TENTATIVO - Introdução à Física do Estado Sólido - Física Moderna IIB - 2S 2022					
DATA	aula n°	Segundas (19h - 21h) - Sala 2001 - Ala Central	aula n°	Quartas (21h - 23h) - Sala 2001 - Ala Central	DATA
15-Aug			1	Apresentação - Curso	18-Aug
22-Aug	2	Revisão - Partículas e ondas - Chocolate	3	Átomos e Ions (Elétrons em átomos) - Tabela Periódica	25-Aug
29-Aug	4	Átomos e Ions (Elétrons em átomos) - Simulação	5	Moléculas e sólidos (Elétrons em sólidos) - impressão 3D	01-Sep
05-Sep	Feriado	Independência do Brasil. Não haverá aula.	Feriado	Independência do Brasil. Não haverá aula.	08-Sep
12-Sep	6	Ordem e Simetria	7	Ondas em cristais – Estruturas cristalinas - Corte/Colar - Origem	15-Sep
19-Sep	8	Estruturas - Átomos em cristais - VR1	9	Estruturas - Átomos em cristais - VR2	22-Sep
26-Sep	10	Vibrações térmicas e Fonons	11	Vibrações térmicas e Fonons - Sonificação	29-Sep
03-Oct	12	Elétrons livres	13	Elétrons livres	06-Oct
10-Oct	14	Condutividade elétrica e teoria de bandas	15	Condutividade elétrica e teoria de bandas	13-Oct
17-Oct	16	Semicondutores	17	Semicondutores - VR3	20-Oct
24-Oct	18	Junção PN - Criação Jogos	19	Junção PN	27-Oct
31-Oct	20	Magnetismo	21	Magnetismo	03-Nov
7/11	22	Supercondutividade	23	Supercondutividade	10-Nov
14/11	Feriado	Dia - República. Não haverá aula.	24	Projeto - Escolha do Tema / Oficina - Infográfico	17-Nov
21/11	25	Nanotecnologia	26	Nanotecnologia	24-Nov
28/11	27	Materiais quânticos	27	Materiais quânticos	01-Dec
05-Dec	29	PROJETO	30	PROJETO	08-Dec
12-Dec	31	Vistas - Notas	32		15-Dec

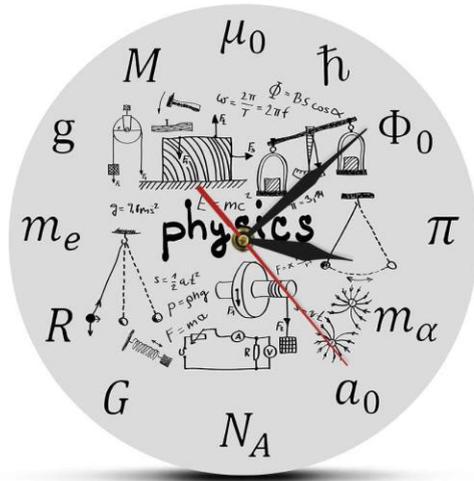
ENTREGA 1

ENTREGA 2

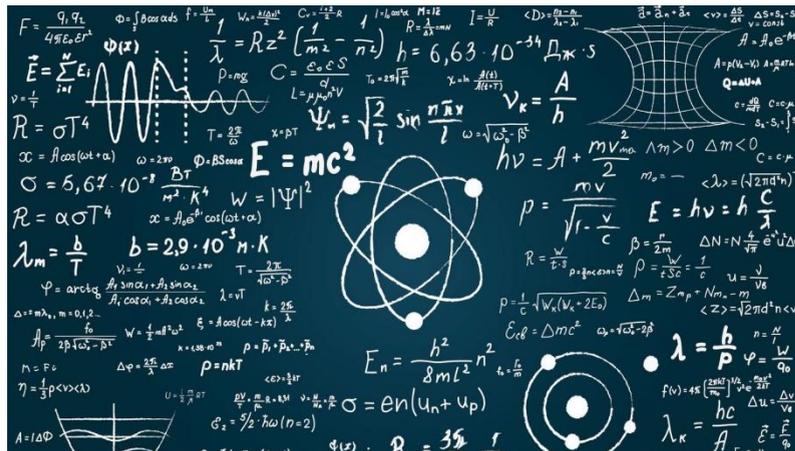
ENTREGA 3

PROJETO

O que teremos hoje ...



E o Prêmio Nobel ...

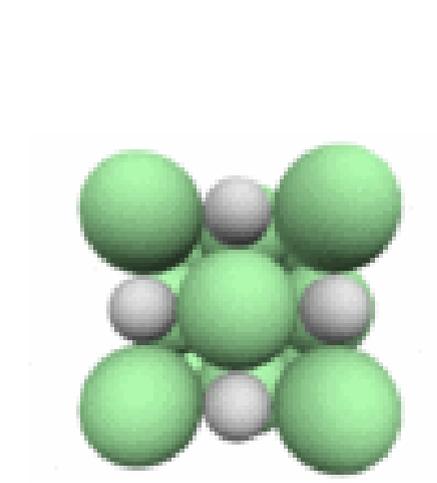
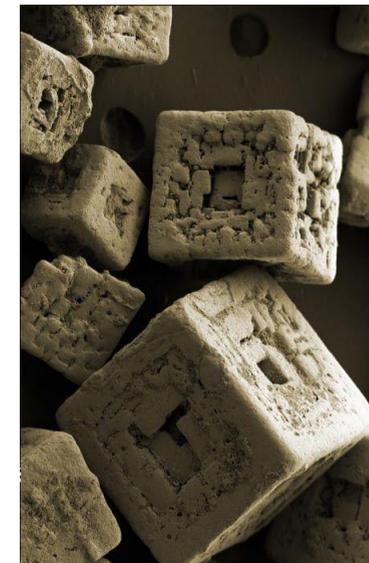
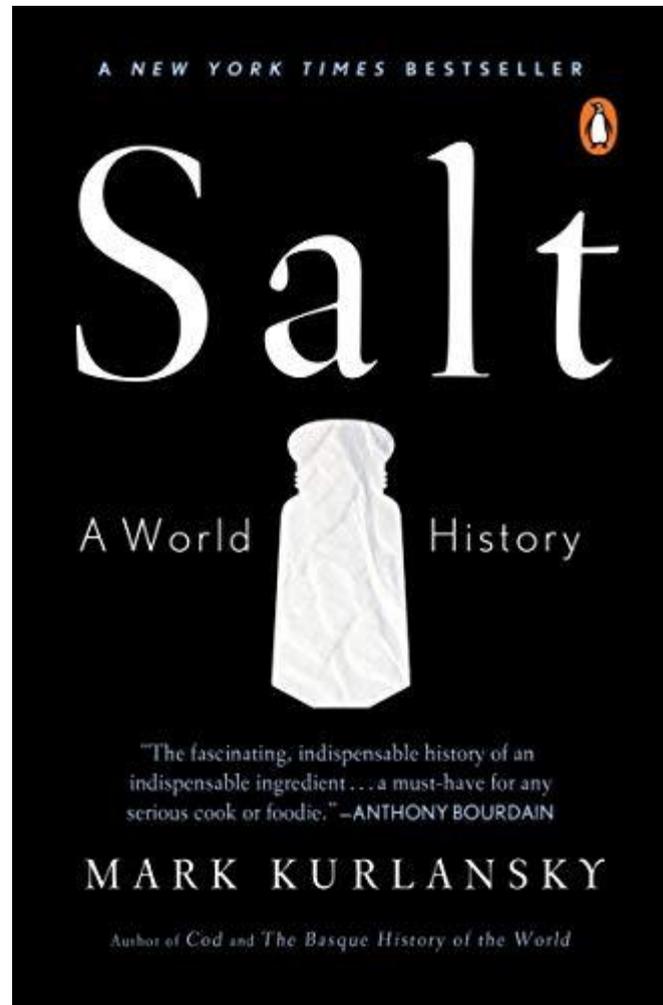


Física é experimental !!!



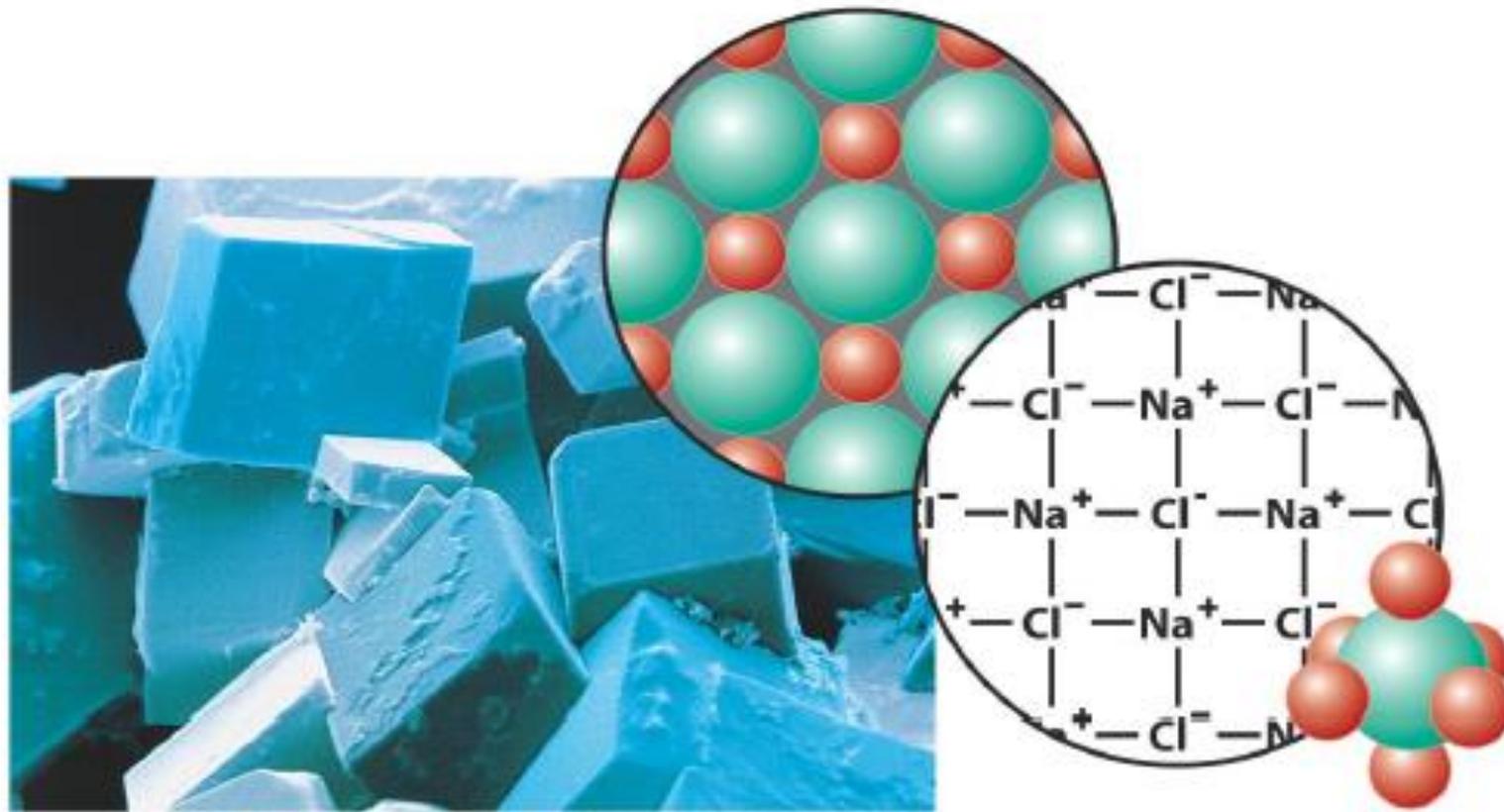
Cadê as equações ?

Salt

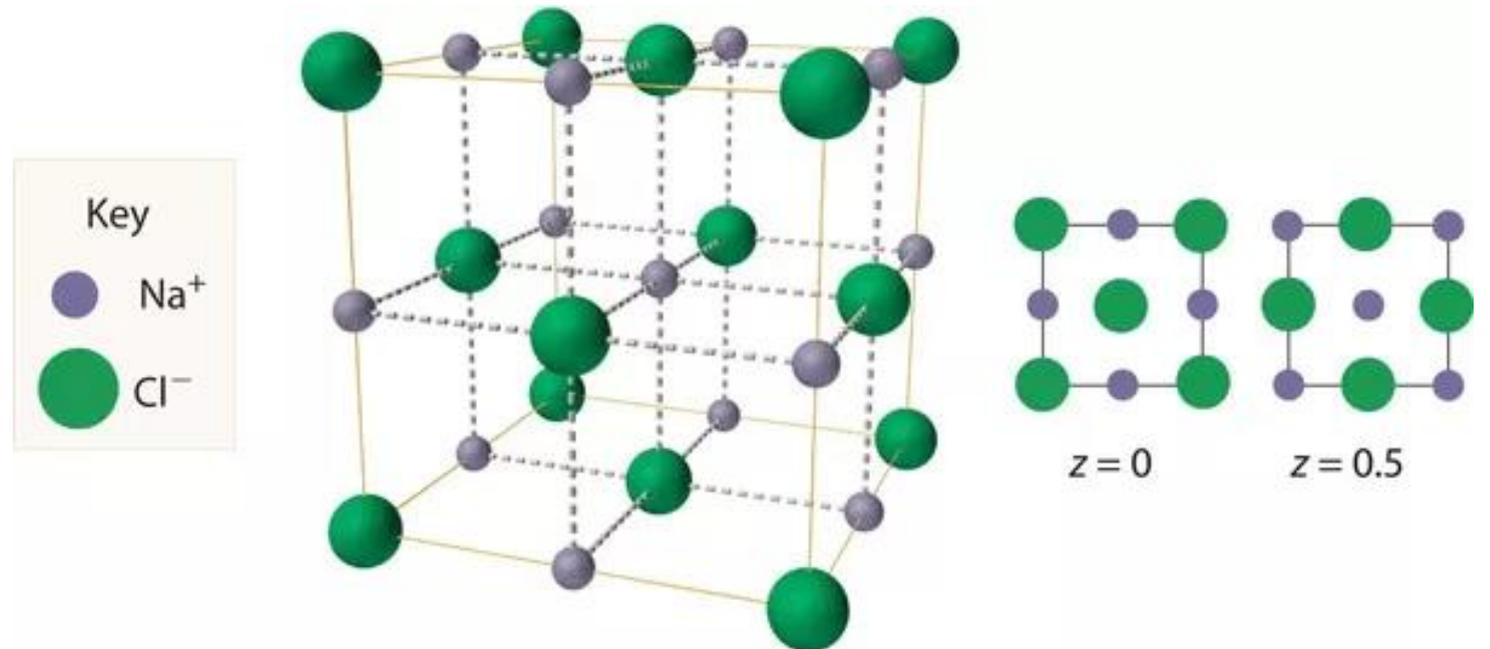


Sólidos iônicos

- menos compactos que sólidos metálicos: raios atômicos de cátions e ânions e cargas;
- número de coordenação: vizinhos mais próximos (n_+ , n_-).



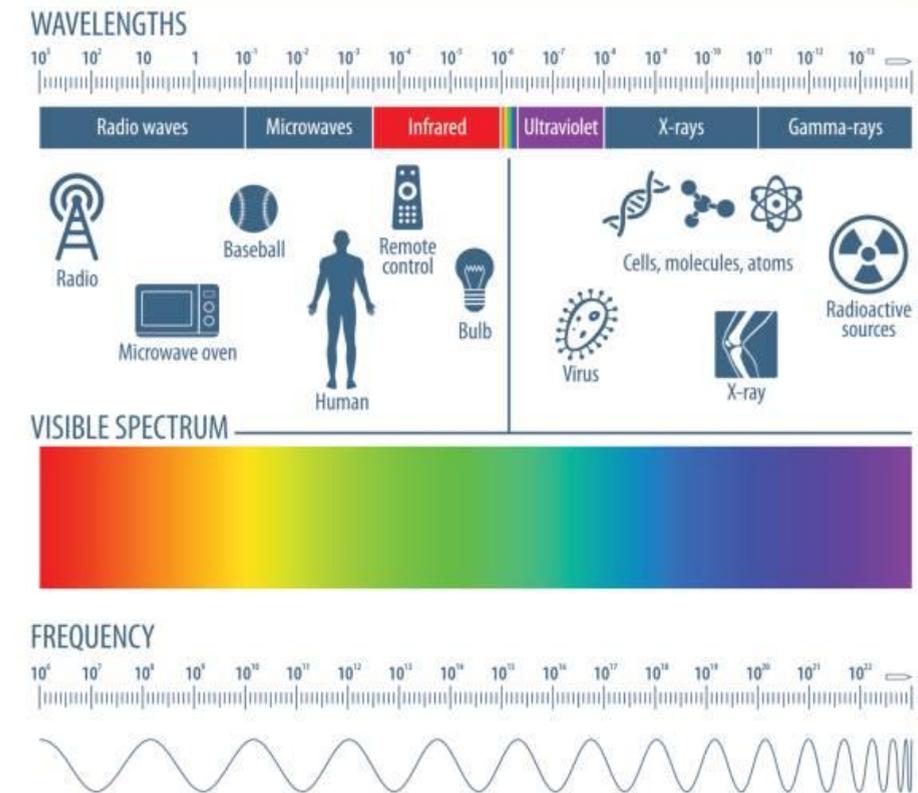
Sal



Acessando a estrutura atômica

Qual comprimento de onda é adequado para estudos da estrutura atômica?

ELECTROMAGNETIC SPECTRUM



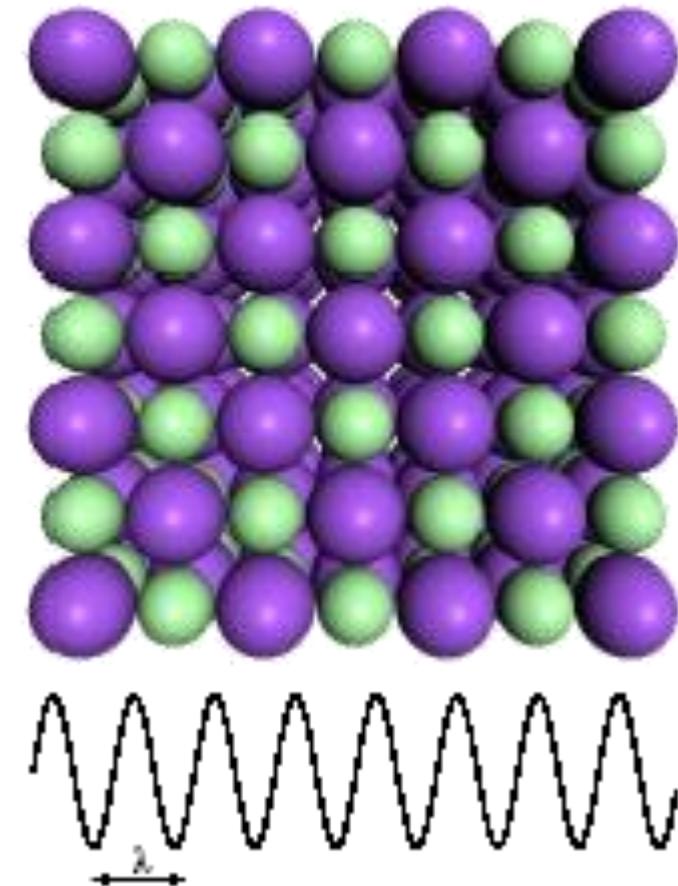
Cristalografia de raio X

Distância típica entre átomos ?

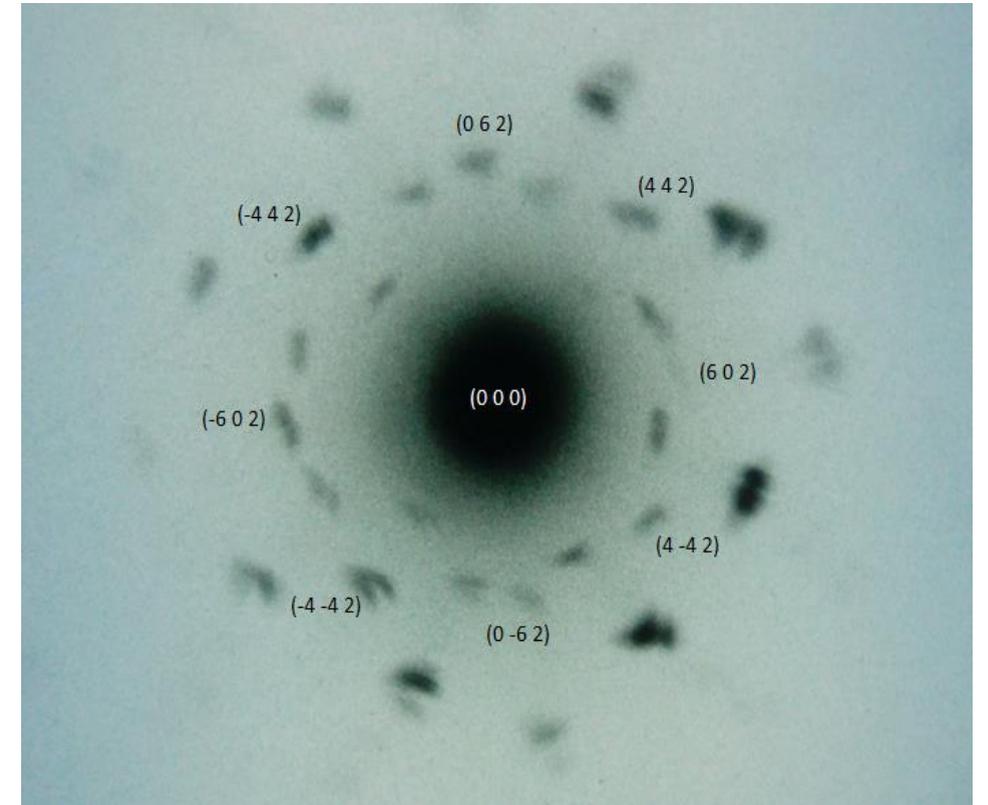
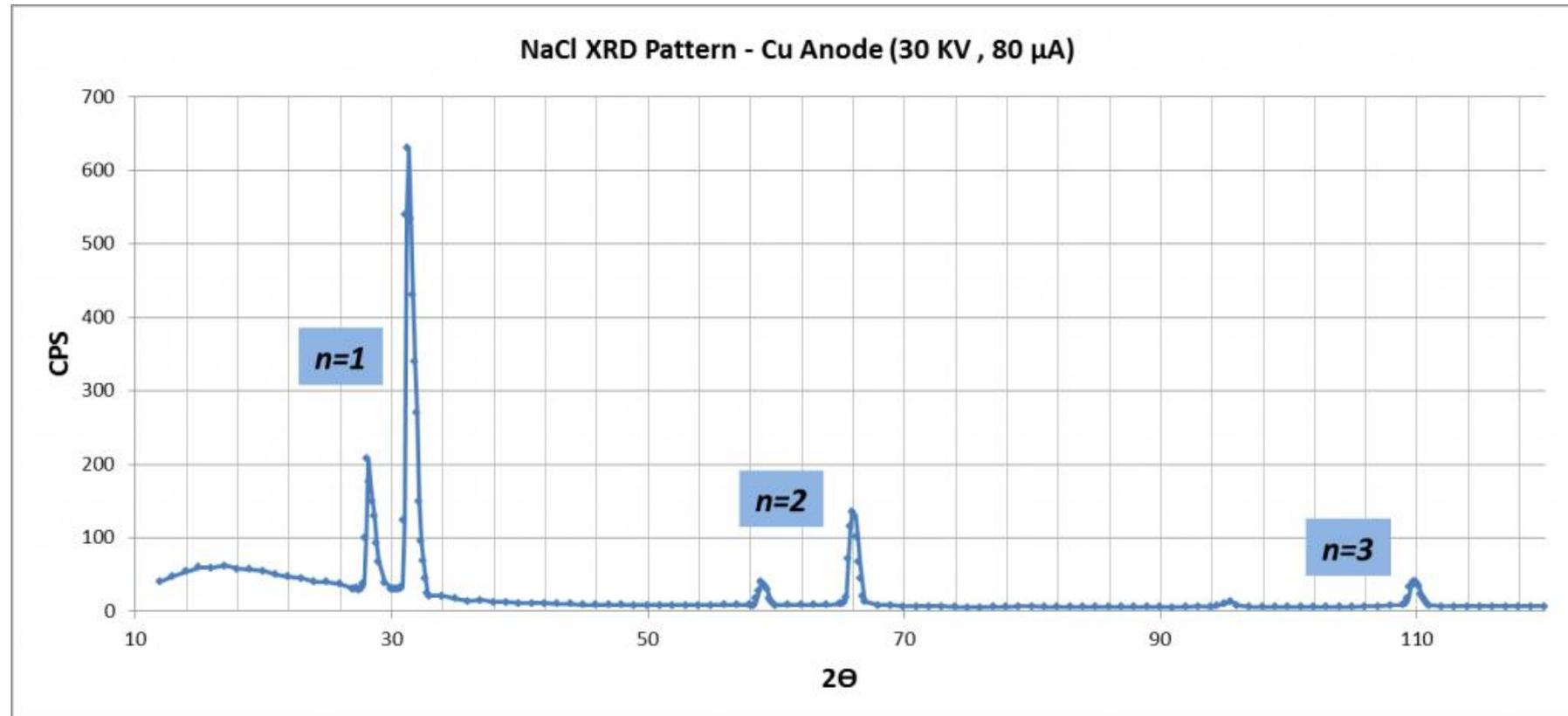
O comprimento de onda de raios-X é tipicamente de 1 \AA , comparável ao espaçamento interplanar (as distâncias entre os átomos ou ions) em sólidos.

Assim precisamos de raios-X

$$E_{x\text{-ray}} = \hbar\omega = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = \frac{hc}{1 \times 10^{-10} \text{ m}} = 12.3 \times 10^3 \text{ eV}$$



Sal



Von Laue's Photograph of Zinc Blende (Sphalerite, ZnS), 1912

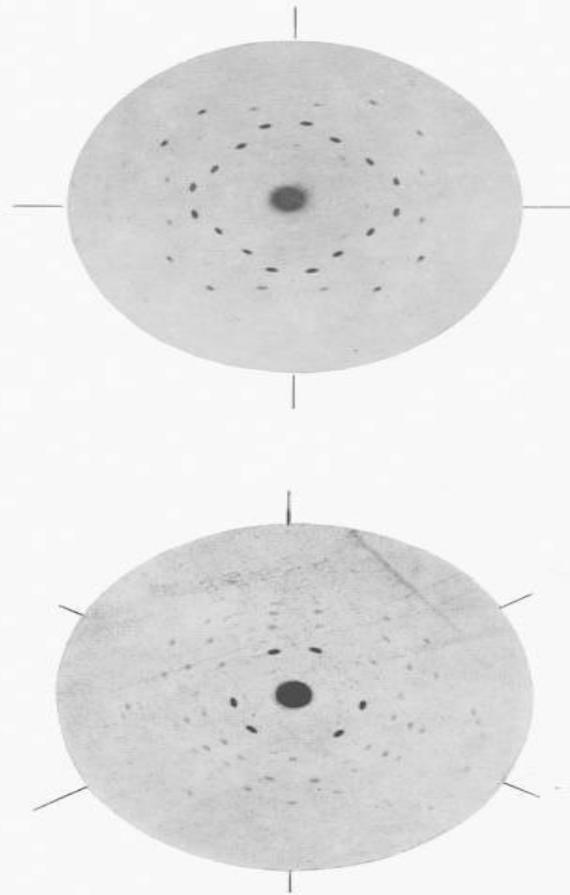
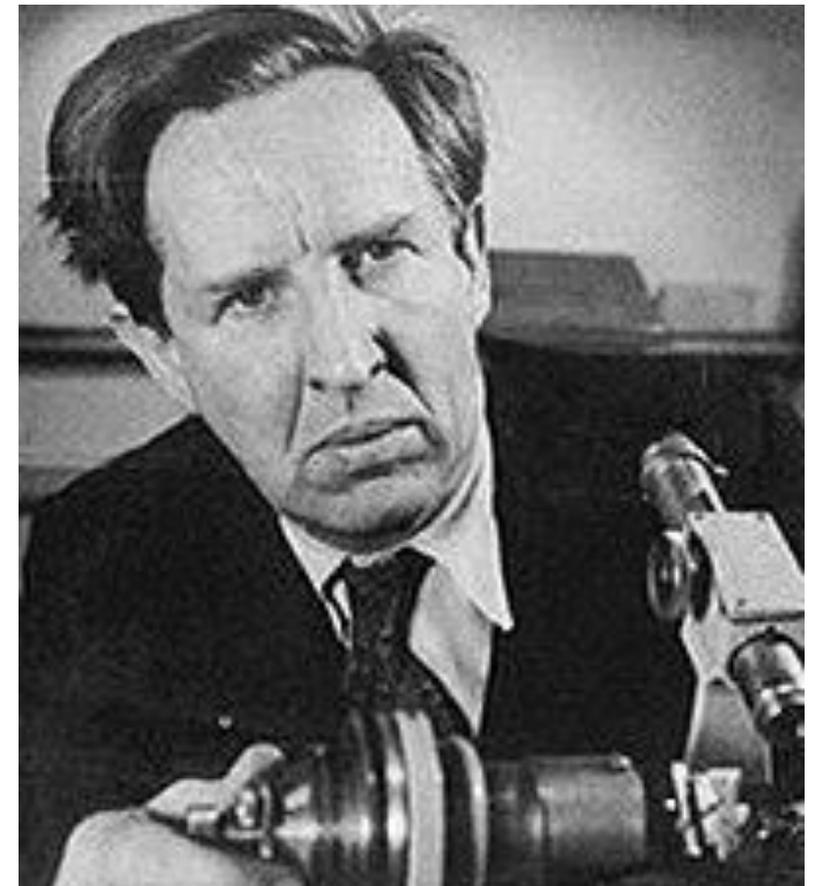
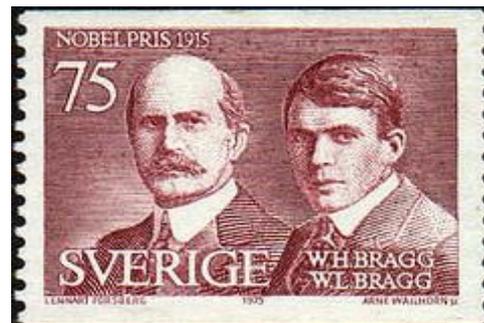
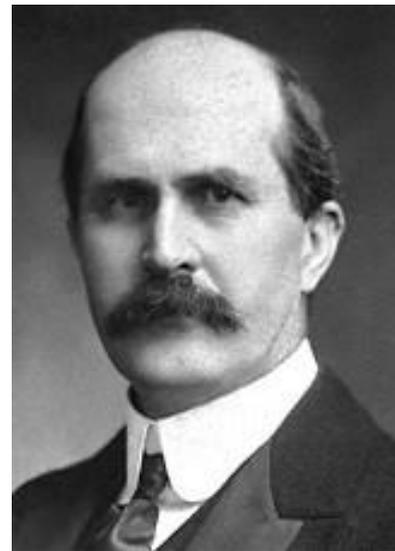
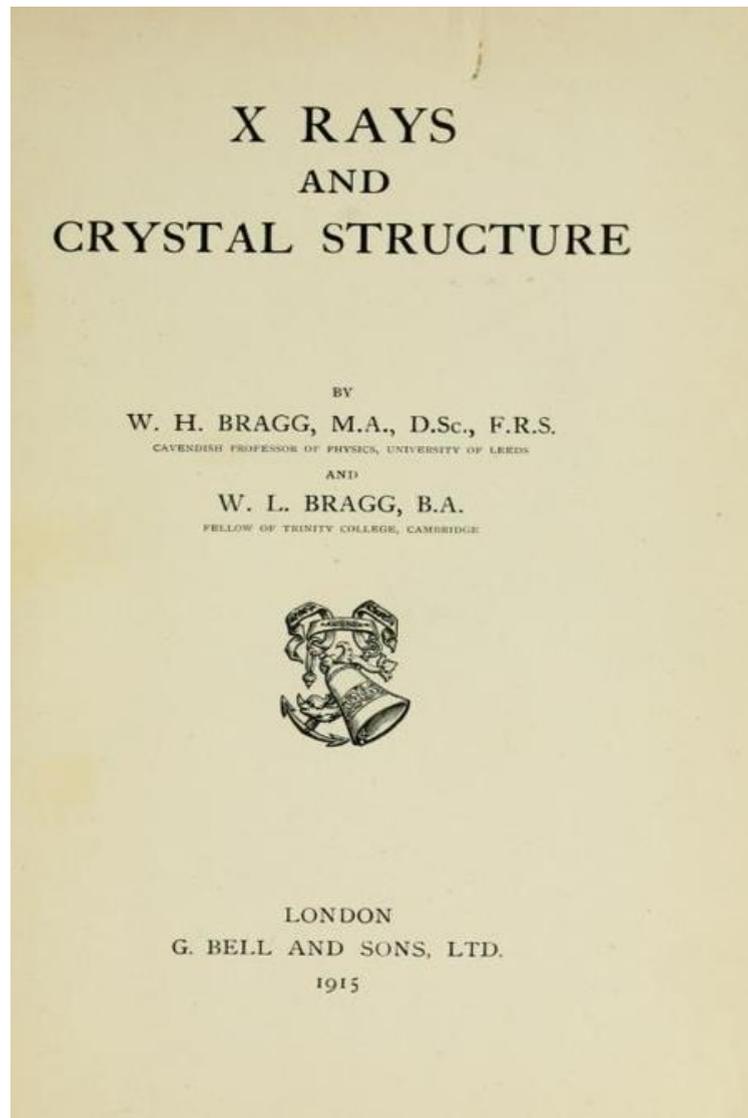


Fig. 4-4(3) and (4). Zinblende Laue photographs along four-fold and three-fold axes.
(Laue, Friedrich & Knipping, *Sitzber. Bayer. Akademie d. Wiss.* 8. Juni 1912).

W. H. & W. L. Bragg, *X-Rays and Crystal Structure* (1915)

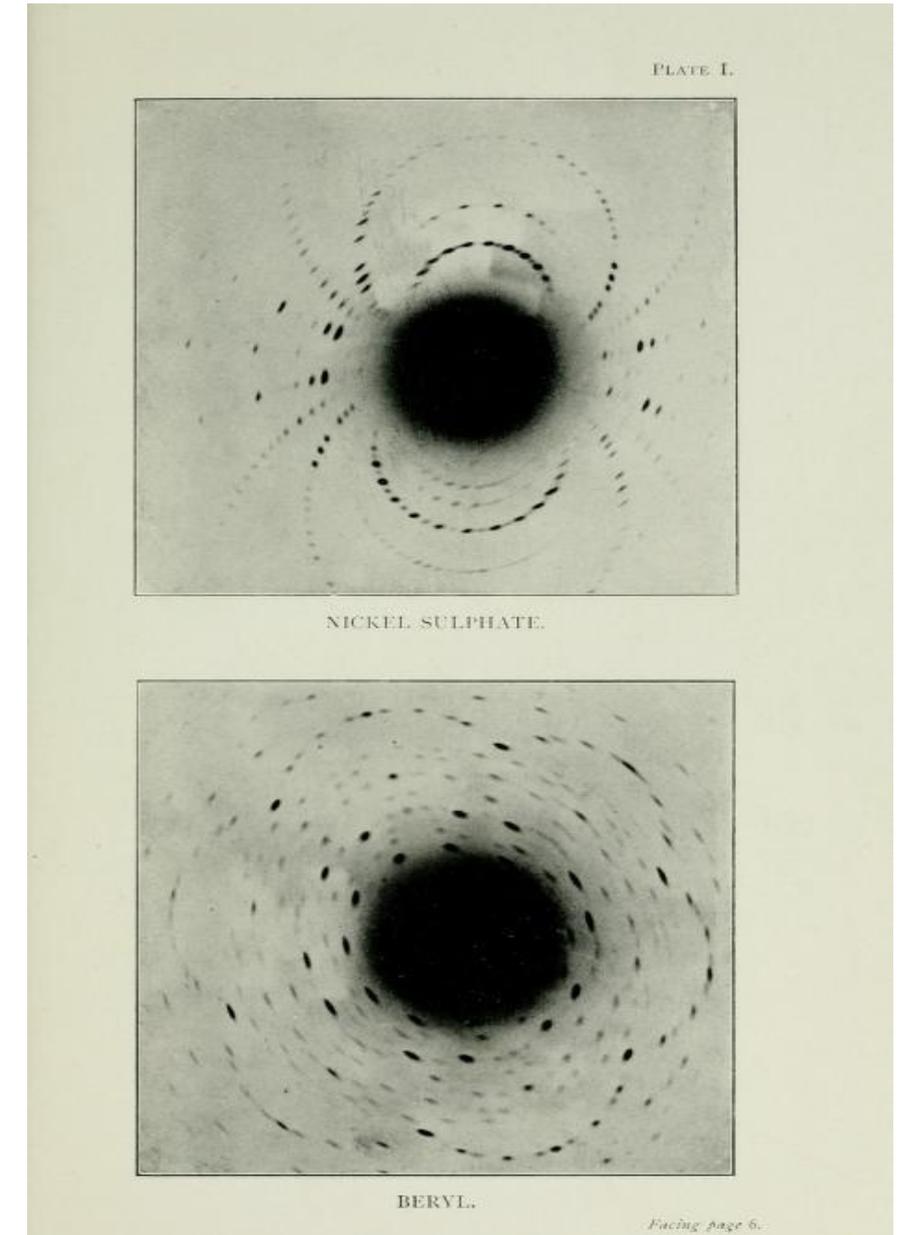


O Prêmio Nobel de Física de 1915 foi concedido conjuntamente a Sir William Henry Bragg e William Lawrence Bragg "for their services in the analysis of crystal structure by means of X-rays"

W.H. & W. L. Bragg, X-Rays and Crystal Structure (1915)

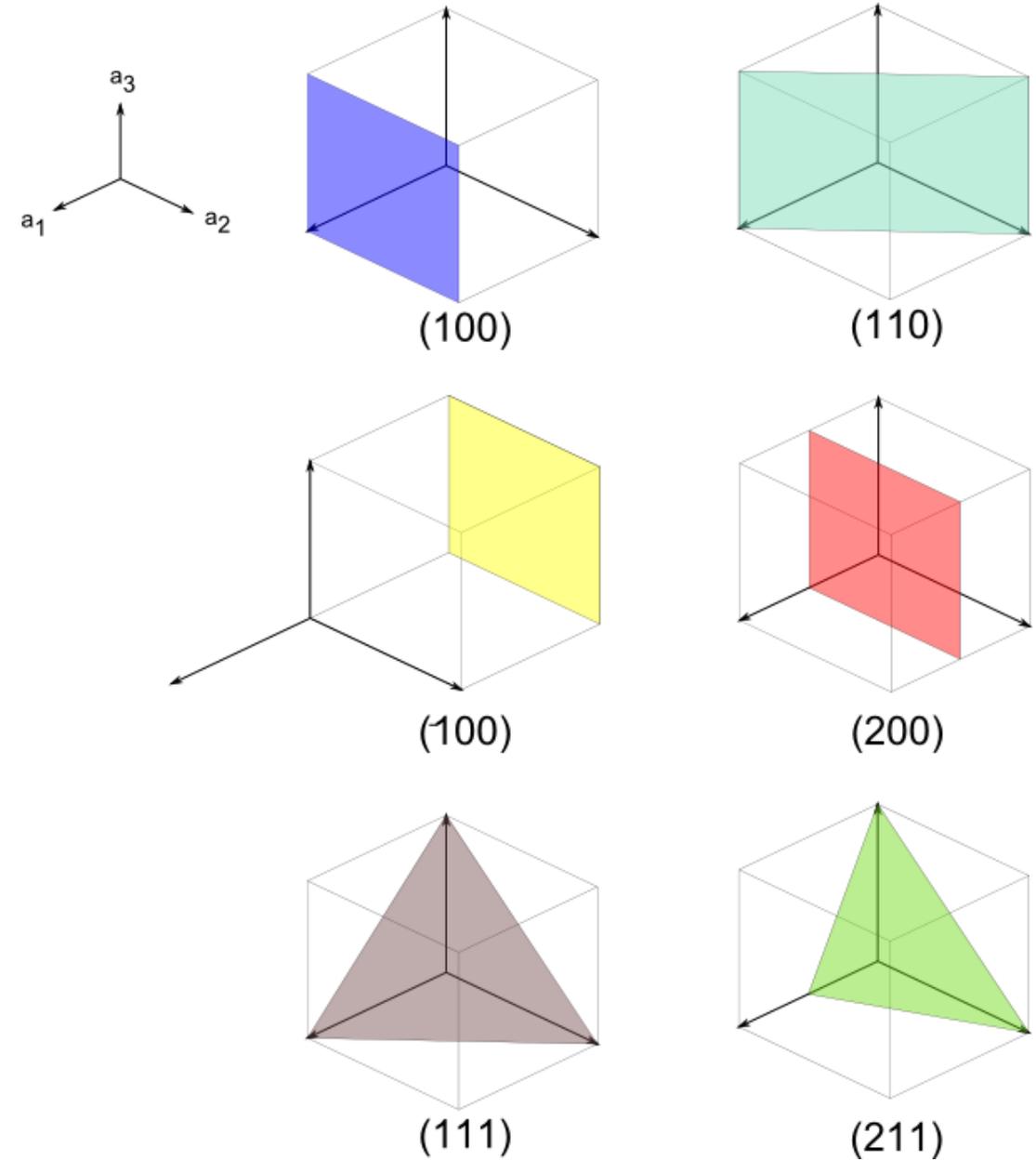
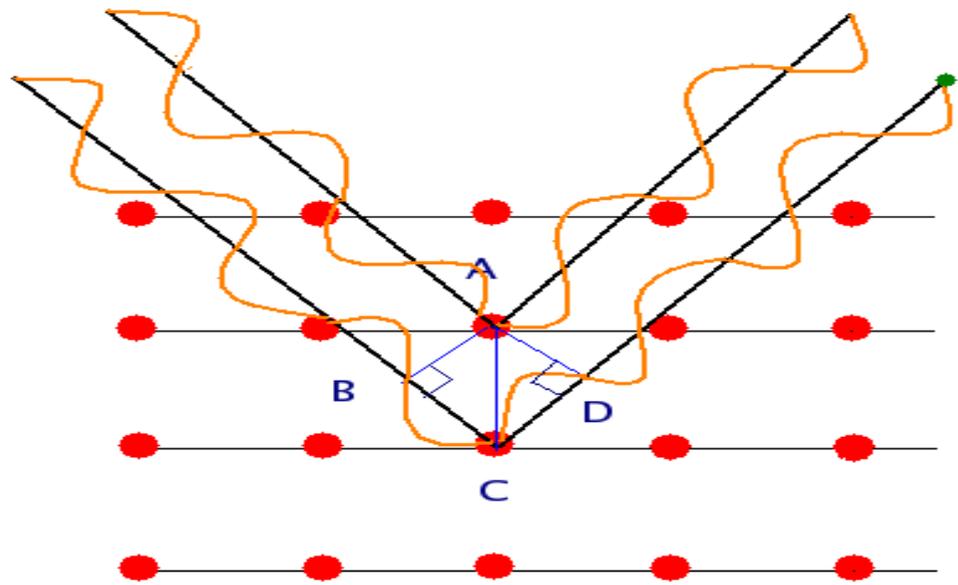
Plate I. "It is natural to suppose that **the Laue pattern owes its origin to the interference of waves diffracted at a number of centres which are closely connected with the atoms or molecules of which the crystal is built**, and are therefore arranged according to the same plan.

The crystal is, in fact, acting as a diffraction grating." (pp. 8-9).



Objetivo

1. Entender a lei de Bragg
2. Entender os planos cristalinos e os índices de Miller

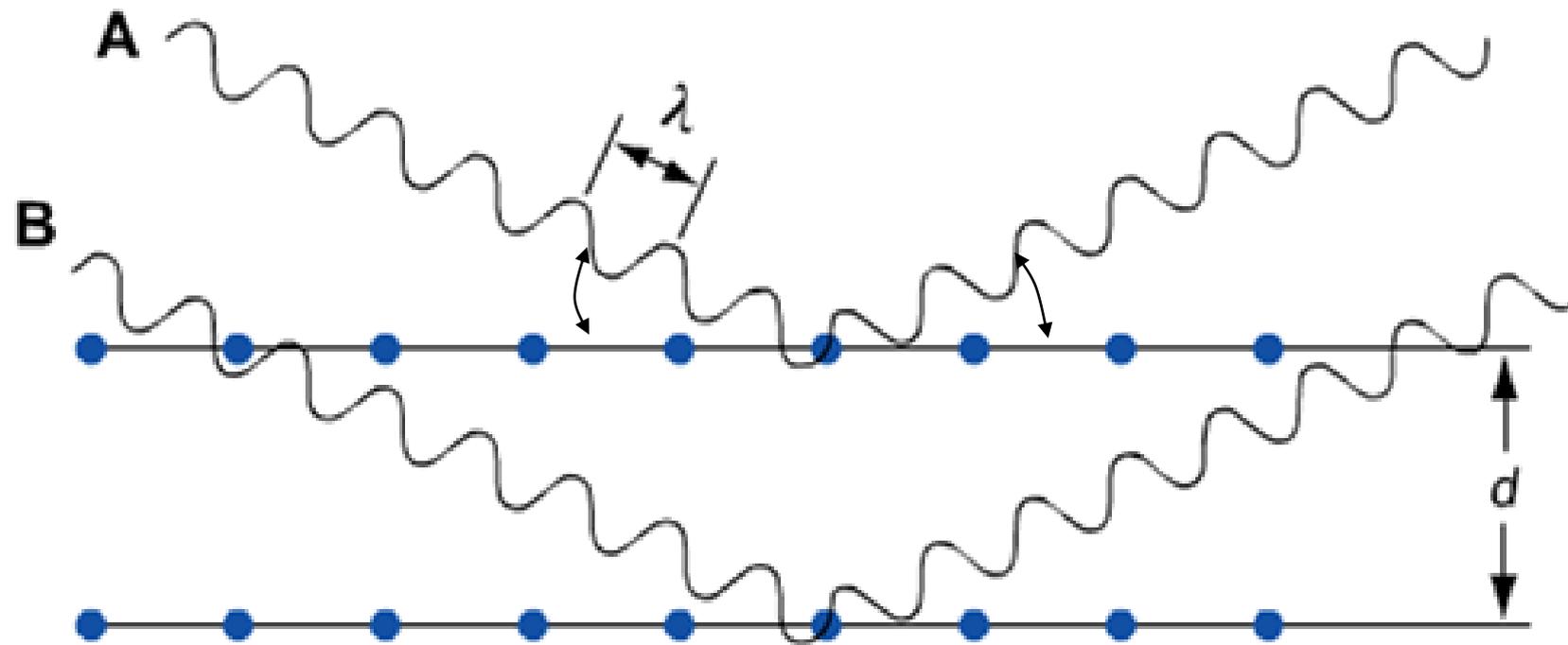


Equação de Bragg

- A lei de Bragg identifica os ângulos da radiação incidente em relação aos planos de rede para os quais ocorrem picos de difração.
- Bragg derivou a condição para a interferência construtiva dos raios X espalhados de um conjunto de planos de rede paralelos.

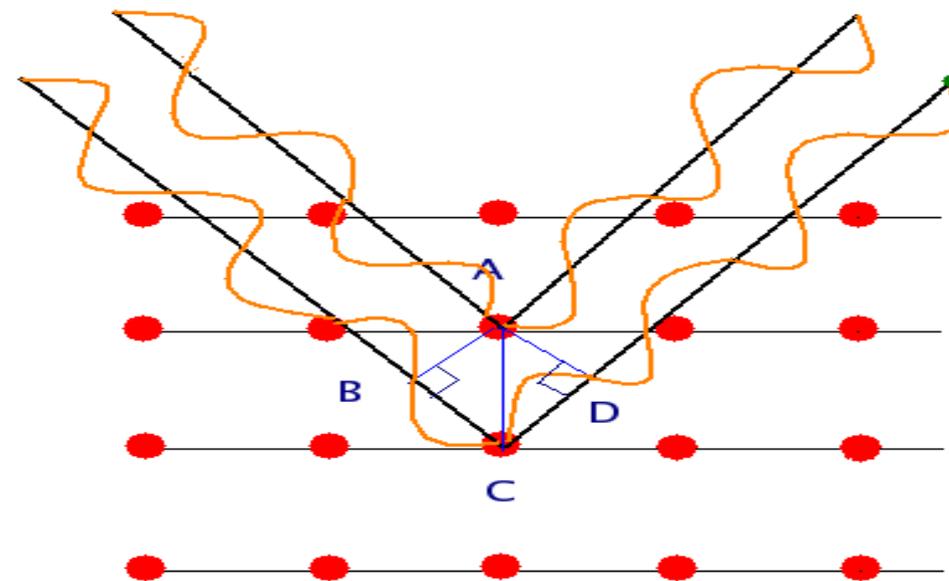
Equação de Bragg

- W.L. Bragg considerava que os cristais eram compostos de planos paralelos de átomos.
- As ondas incidentes são refletidas specularmente a partir de planos paralelos de átomos no cristal, com cada plano refletindo apenas uma fração muito pequena da radiação, como um espelho levemente prateado.
- Na reflexão especular, o ângulo de incidência é igual ao ângulo de reflexão.



Condição de difração

- Os feixes difratados ocorrem quando as reflexões dos planos dos átomos interferem construtivamente.
- Tratamos o espalhamento elástico, no qual a energia dos raios X não é alterada na reflexão.

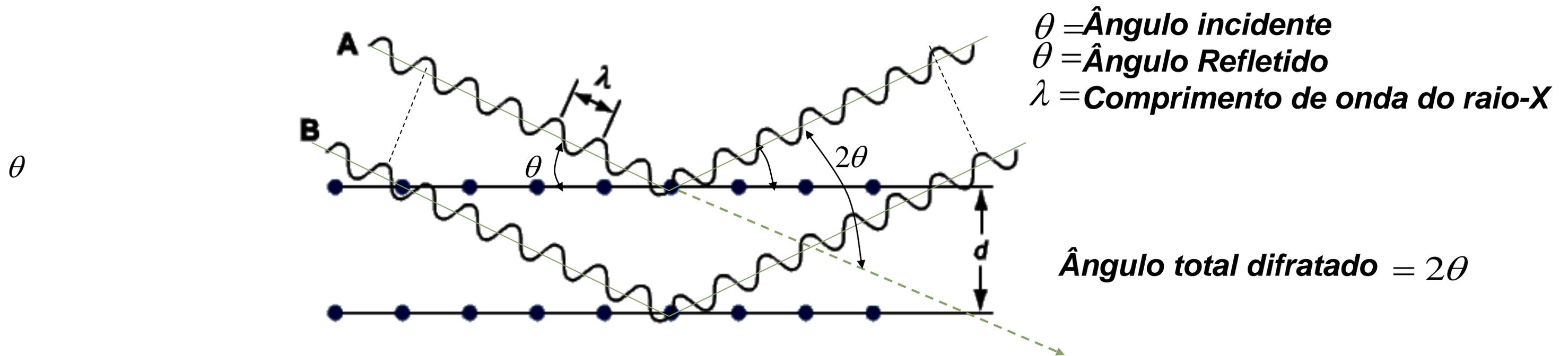


Equação de difração

Quando os raios X atingem uma camada de um cristal, alguns deles serão refletidos.

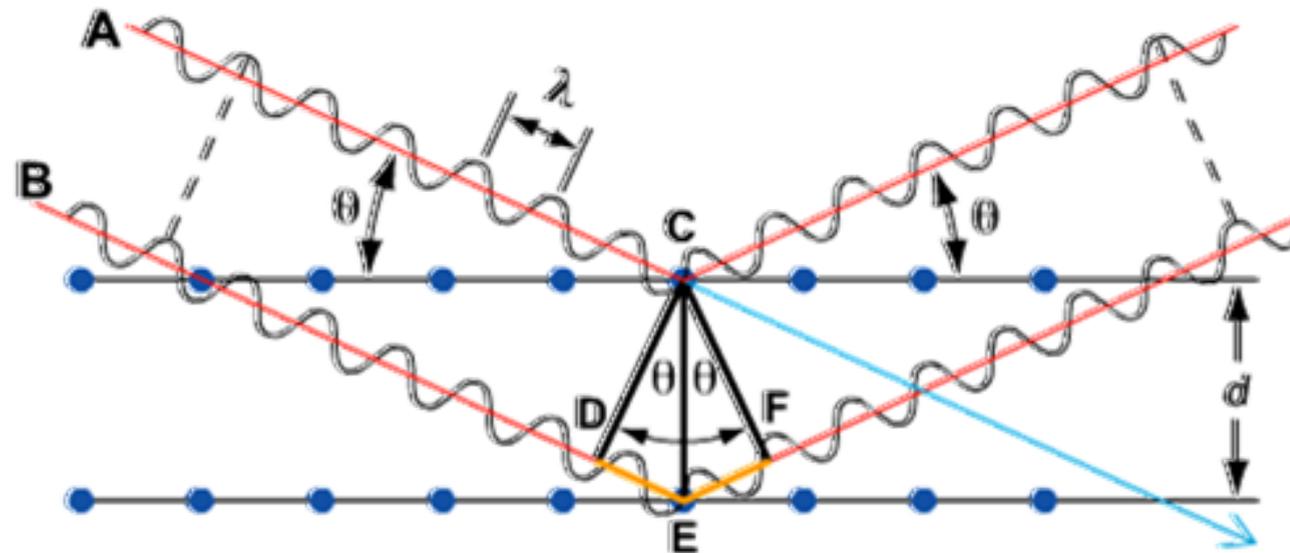
Estamos interessados em raios X que estão em **fase** uns com os outros.

Raios-X que se somam construtivamente na análise de difração de raios-X em fase antes de serem refletidos e depois de refletidos.



Equação de Bragg

- Esses dois feixes de raios X percorrem distâncias ligeiramente diferentes. A diferença nas distâncias percorridas está relacionada à distância entre as camadas adjacentes.
- Conectar as duas camadas com linhas perpendiculares mostra a diferença entre os planos superior e inferior.

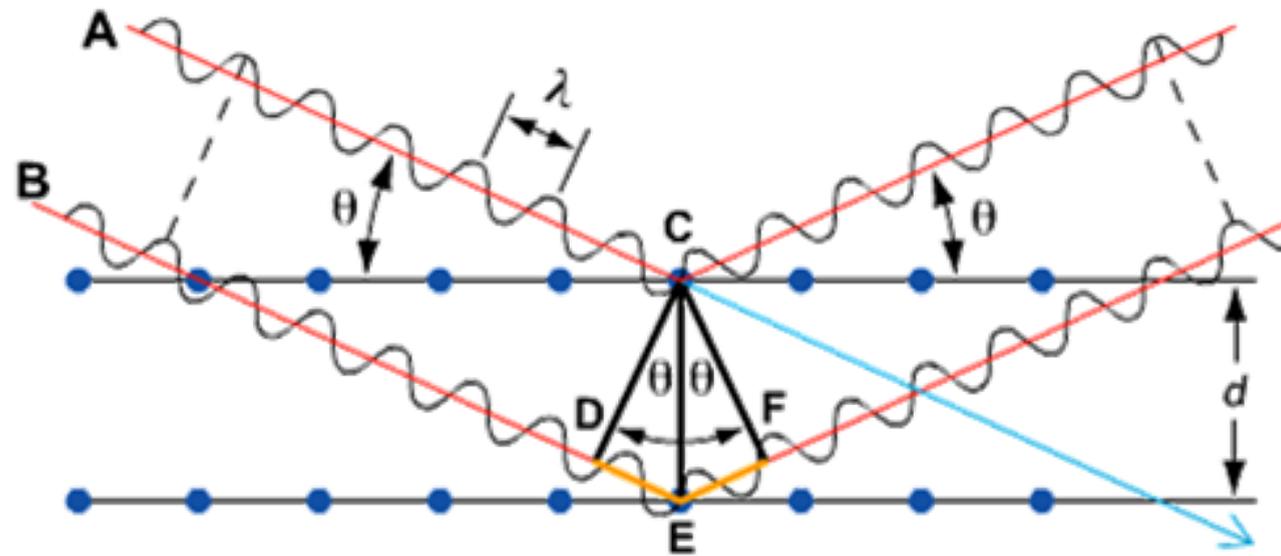


A linha CE é equivalente à distância entre as duas camadas (d)

$$DE = d \sin \theta$$

Equação de Bragg

O comprimento DE é o mesmo que EF, então a distância total percorrida pela onda de fundo é expressa por:



$$EF = d \sin \theta$$

$$DE = d \sin \theta$$

$$DE + EF = 2d \sin \theta$$

$$n\lambda = 2d \sin \theta$$

A interferência construtiva da radiação de planos sucessivos ocorre quando a diferença de caminho é um número inteiro de comprimentos de onda.

Equação de Bragg

$$2d \sin \theta = n\lambda$$

onde, d é o espaçamento dos planos e n é a ordem de difração.

A reflexão de Bragg só pode ocorrer para comprimento de onda

$$2d \sin \theta = n\lambda$$

$$n\lambda \leq 2d$$

É por isso que não podemos usar a luz visível. Nenhuma difração ocorre quando a condição acima não é satisfeita.

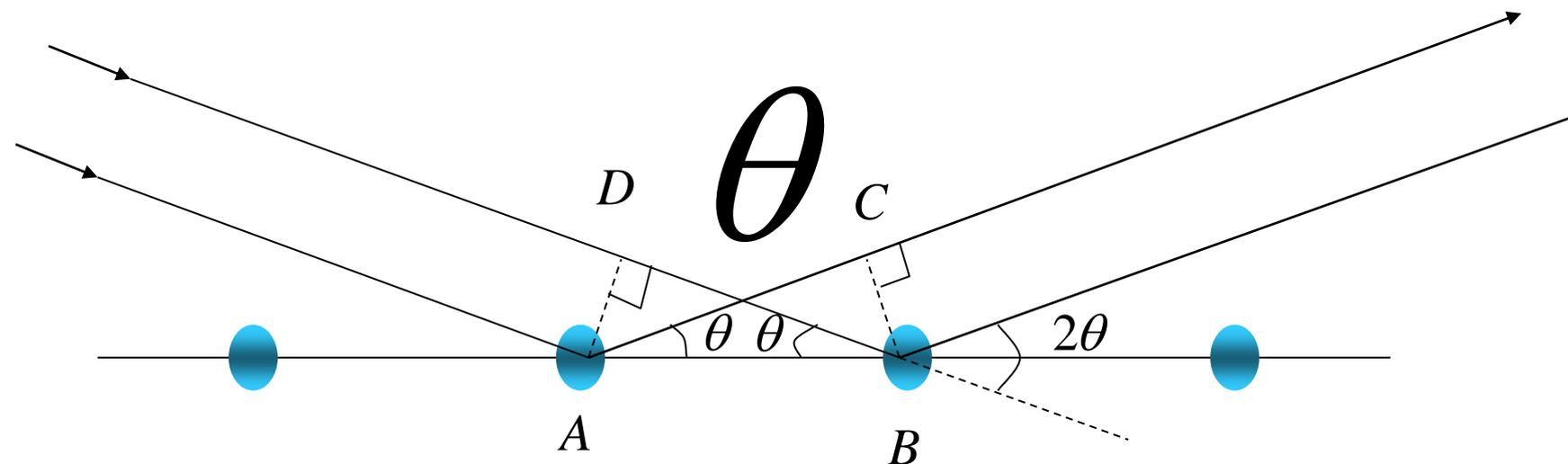
$$n\lambda \leq 2d$$

Os feixes difratados (reflexões) de qualquer conjunto de planos de rede só podem ocorrer em ângulos particulares previstos pela lei de Bragg.

Espalhamento de raios-X dos pontos de rede adjacentes A e B

Os raios X incidem em um ângulo θ em um dos planos do conjunto.

Haverá interferência construtiva das ondas espalhadas pelos dois pontos sucessivos da rede A e B no plano se as distâncias AC e DB forem iguais.



Interferência construtiva de ondas espalhadas no mesmo plano

Se a onda espalhada faz o mesmo ângulo com o plano que a onda incidente



A onda difratada parece ter sido refletida do plano

Consideramos o espalhamento de pontos de rede em vez de átomos porque é a base dos átomos associados a cada ponto de rede que é a verdadeira unidade de repetição do cristal;

O ponto de rede é análogo à linha na rede de difração óptica e a base representa a estrutura da linha.

Difração máxima

- O espalhamento coerente de um único plano não é suficiente para obter um máximo de difração.
- Também é necessário que os planos sucessivos se espalhem em fase



Este será o caso se a diferença de caminho para a dispersão de dois planos adjacentes for um número inteiro de comprimentos de onda



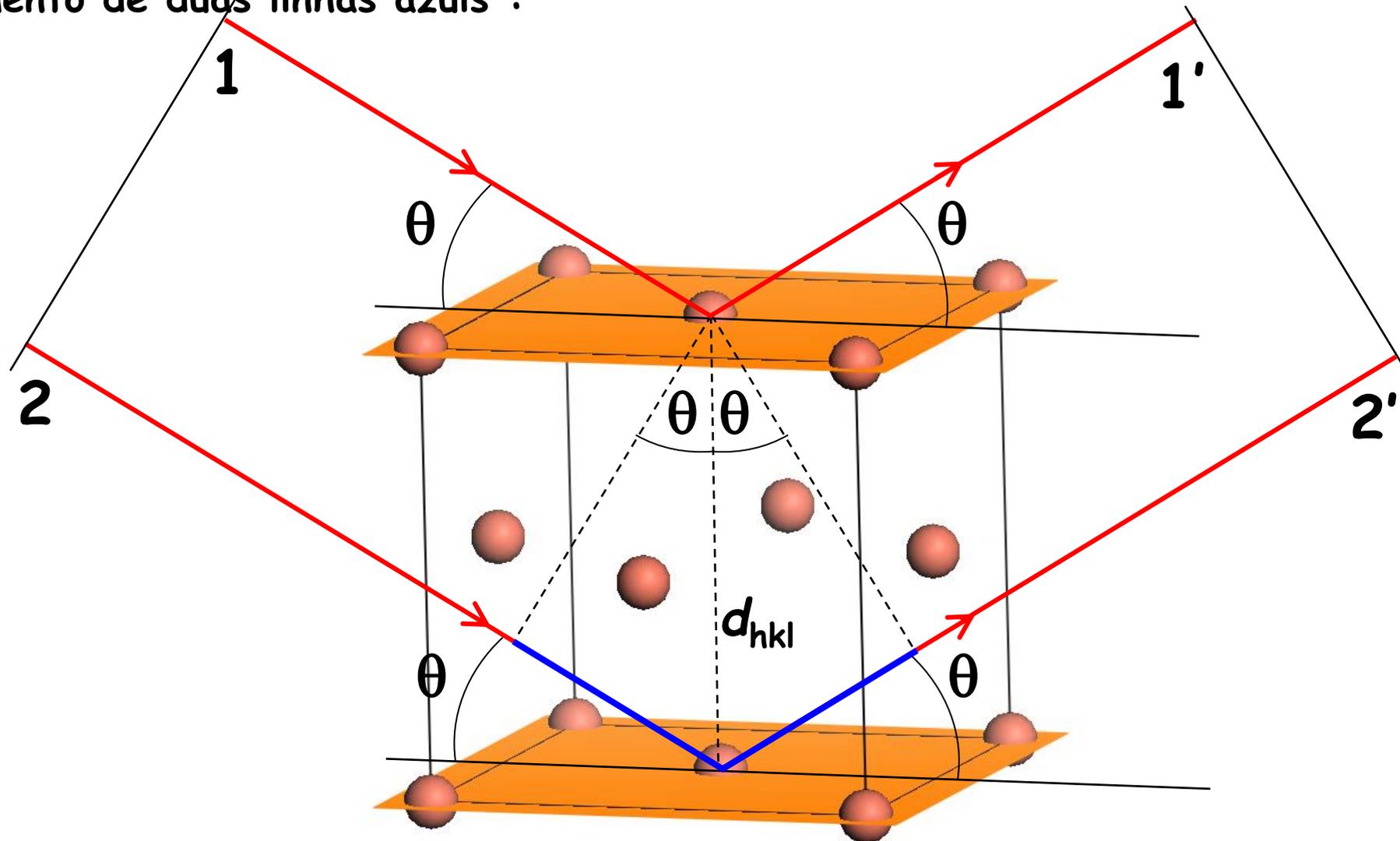
$$2d \sin \theta = n\lambda$$

Difração segundo Bragg

Os raios X que atingem o cristal são elasticamente espalhados pelos conjuntos de planos (hkl)

A diferença de trajetória para raios 1 e 2 é igual ao comprimento de duas linhas azuis :

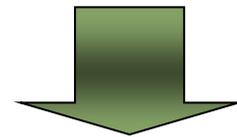
$$\Delta(1 - 2) = 2d_{hkl} \sin \theta$$



Indexando os planos de reflexão

- Para rotular as reflexões, os índices de Miller dos planos podem ser usados.
- Um feixe correspondente a um valor de $n > 1$ pode ser identificado por uma declaração como “as reflexões de ordem n dos planos (hkl) ”.
- $(nh \ nk \ nl)$ reflexão

Reflexão de terceira ordem do plano (111)



reflexão (333)

n-ésima ordem de difração fora dos planos (hkl)

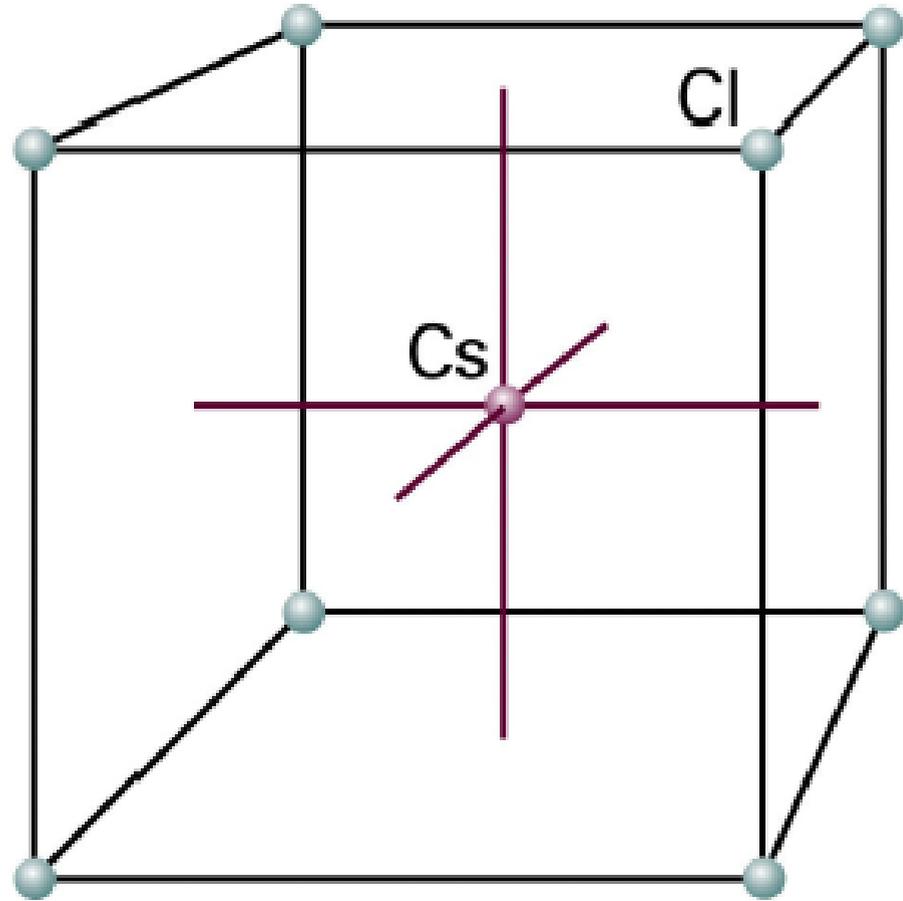
Reescrevendo a lei de Bragg

$$2\left(\frac{d}{n}\right)\sin\theta = \lambda$$

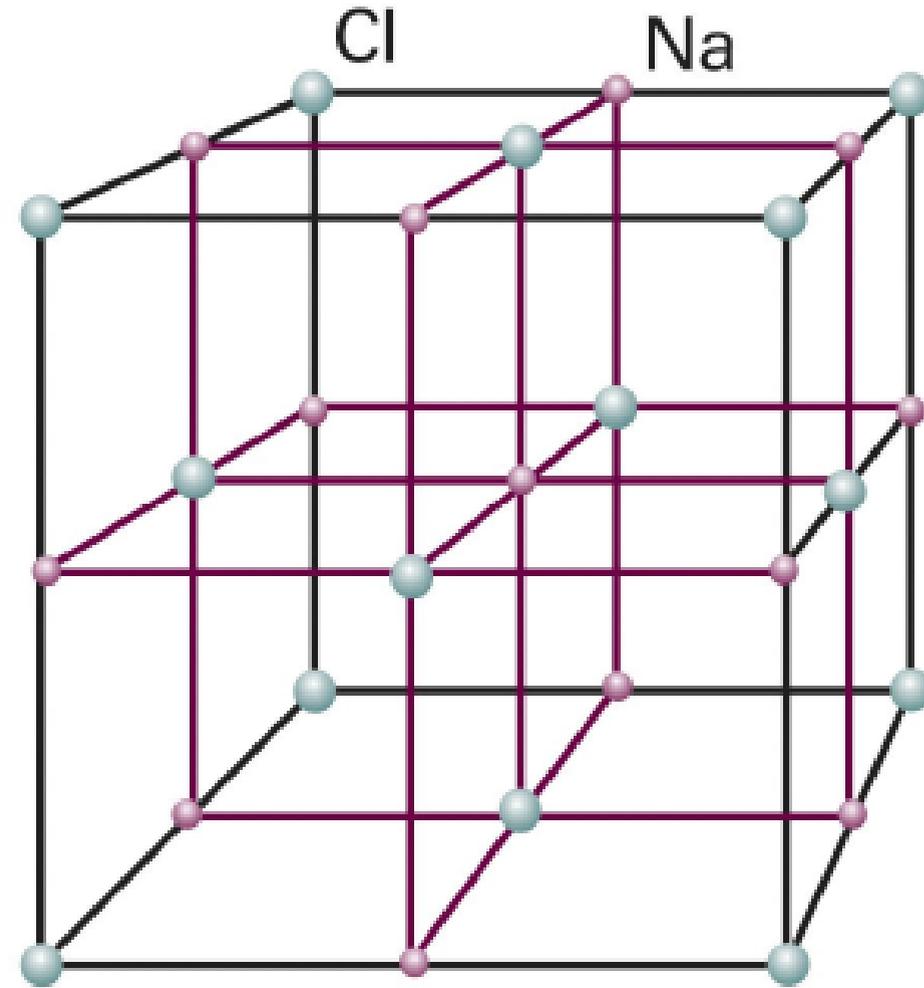
o que faz com que os planos de difração de n-ésima ordem (hkl) de espaçamento 'd' pareçam difração de primeira ordem de planos de espaçamento d/n.

Planos com este espaçamento reduzido teriam índices de Miller (nh nk nl).

Estruturas em sólidos



CsCl, coordenação (8,8)

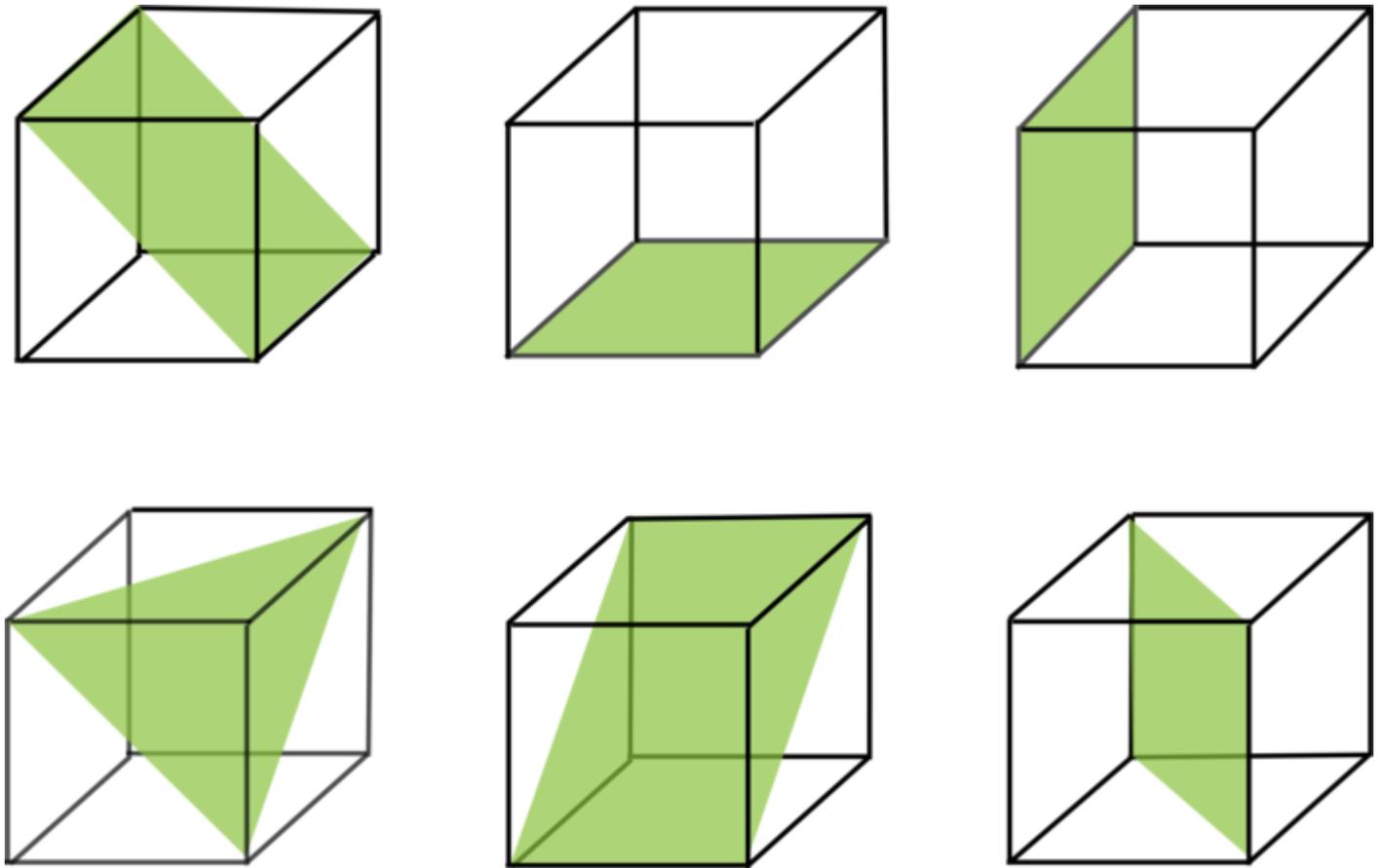


NaCl, coordenação (6,6)
cfc expandida

Sólidos iônicos

Índices de Miller e Planos cristalinos

Precisamos de uma nomenclatura para identificar os planos cristalinos



Regras para índices Miller – Planos e direções

Os átomos formam planos dispostos periodicamente

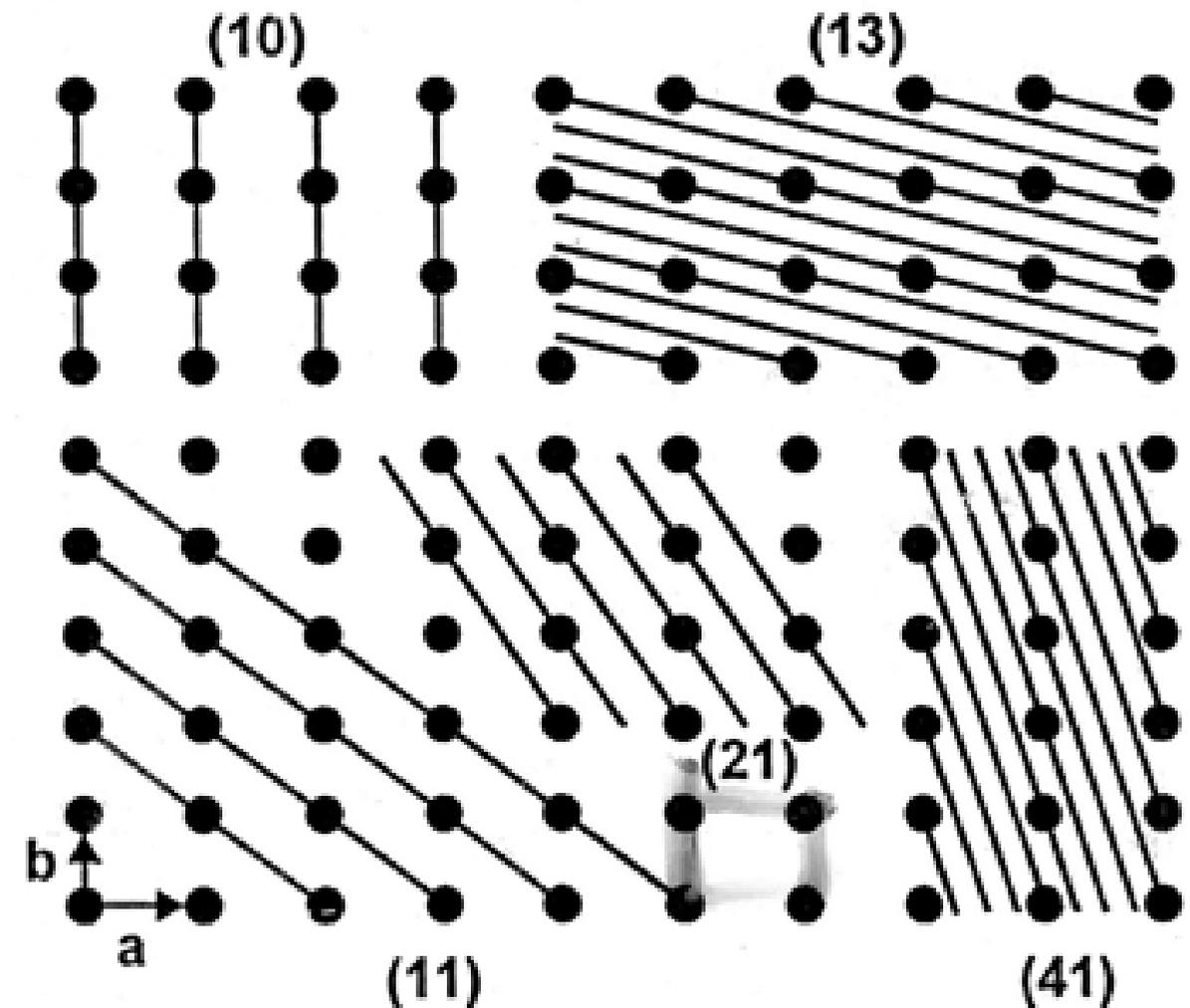
Qualquer conjunto de planos é caracterizado por:

- (1) sua orientação no cristal (hkl) – índices de Miller
- (2) seu espaçamento d (d_{hkl}) – distância entre os planos

h, k, l correspondem ao número de segmentos em que os eixos a, b, c , respectivamente, são cortados pelo conjunto de planos

Em média, quanto maior (hkl), quanto mais próxima é a distância interplanar, d_{hkl}

Exemplos 2-D



Índices de Miller e Planos cristalinos

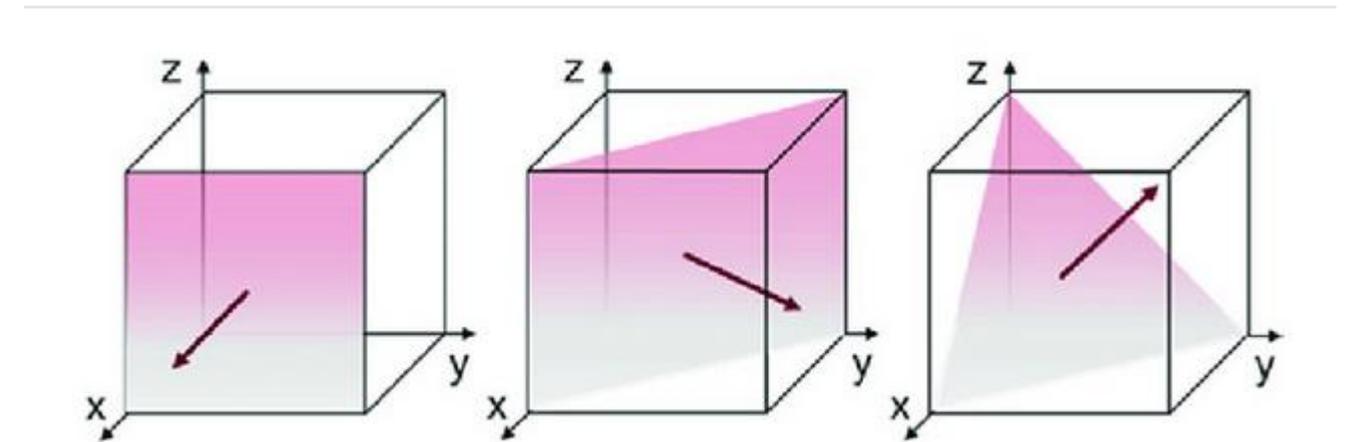
Índices de Miller:

Usamos o vetor normal ao plano

Exemplo:

Na primeira imagem:

Vetor normal $x \rightarrow$ índice (100)



Regras para índices Miller – Planos e direções

Um índice de Miller genérico é indicado por (hkl).

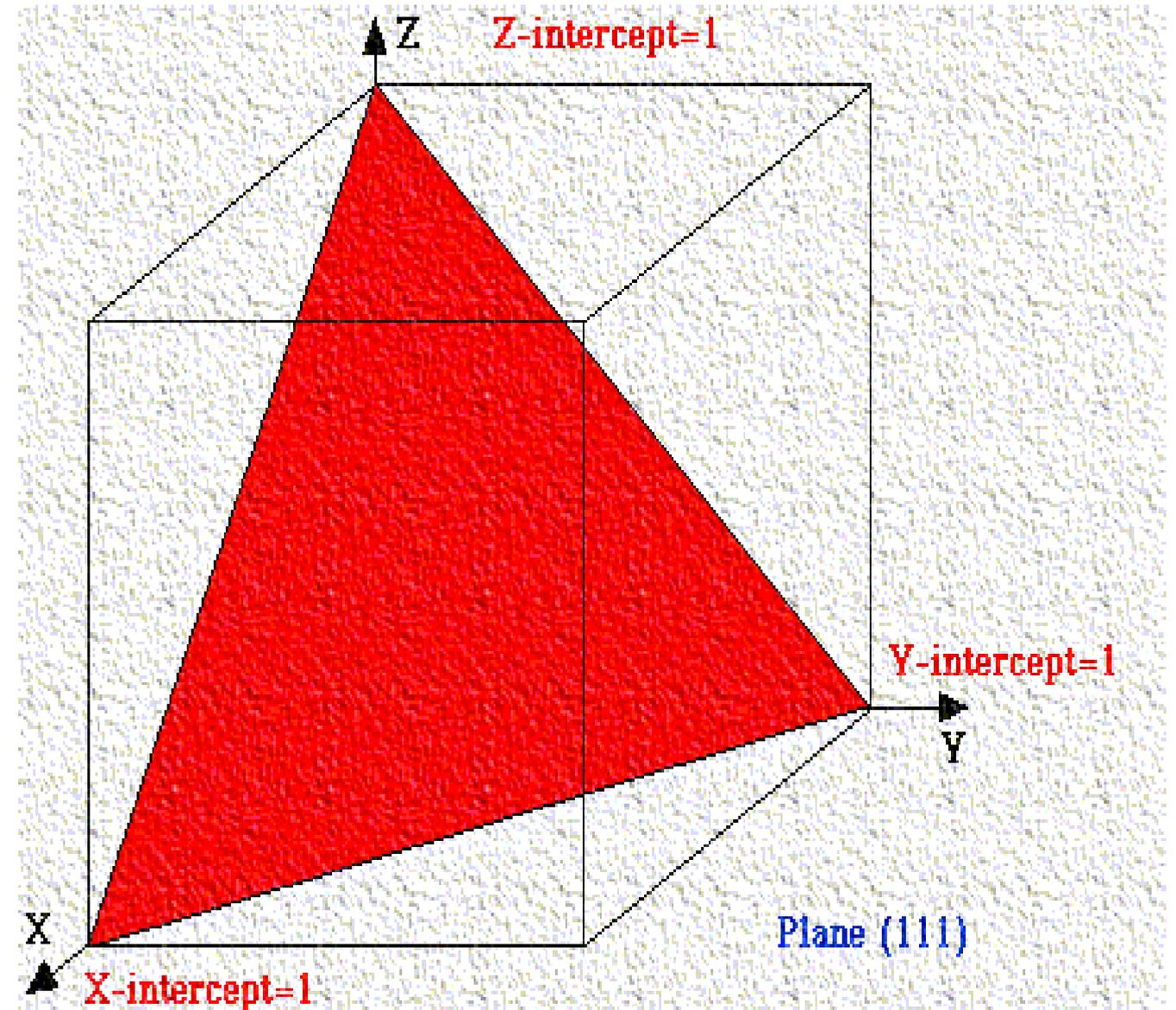
Determine as intercepções da face ao longo dos eixos cristalográficos, em termos de dimensões da célula unitária.

Pegue os recíprocos

Limpar frações

Reduza para os termos mais baixos

Se um plano é paralelo a um eixo, sua intercepção é no infinito e seu índice de Miller é zero.



Índices de Miller e Planos cristalinos

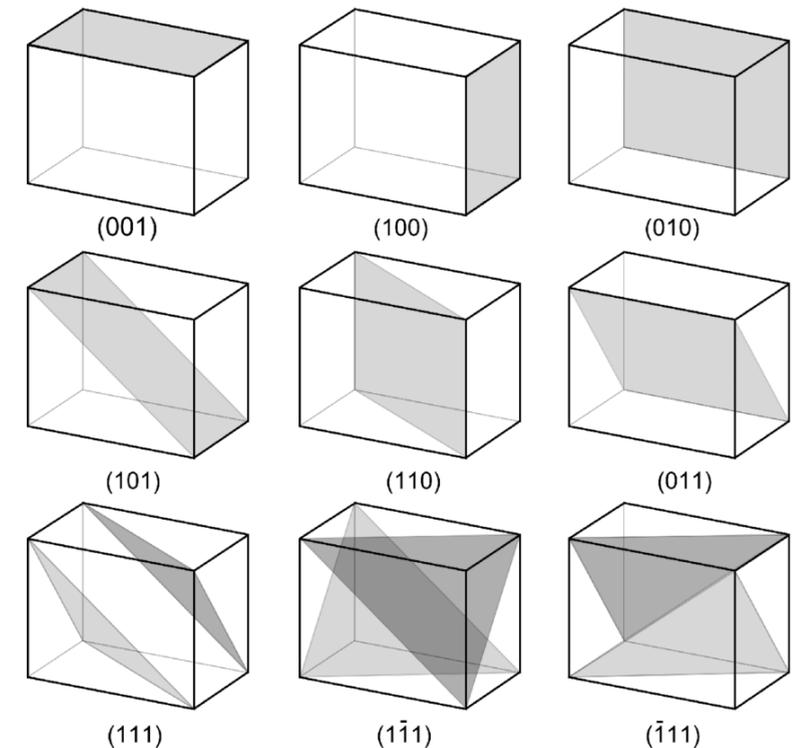
Índices de Miller:

↳ Usamos o vetor normal ao plano

Em estruturas cúbicas:

$$d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}},$$

em que a é o parâmetro de rede e h, k, l são os índices de Miller (h, k, l)



Atividade: acoplando aprendizagem/ensino

Grupos de 4 - Uso de demonstrações computacionais para:

Parte A – Explorações:

- 1) G1 - Determinar e visualizar os índices de Miller (2 componentes)
- 2) G2 - Experimento da lei de Bragg (2 componentes)

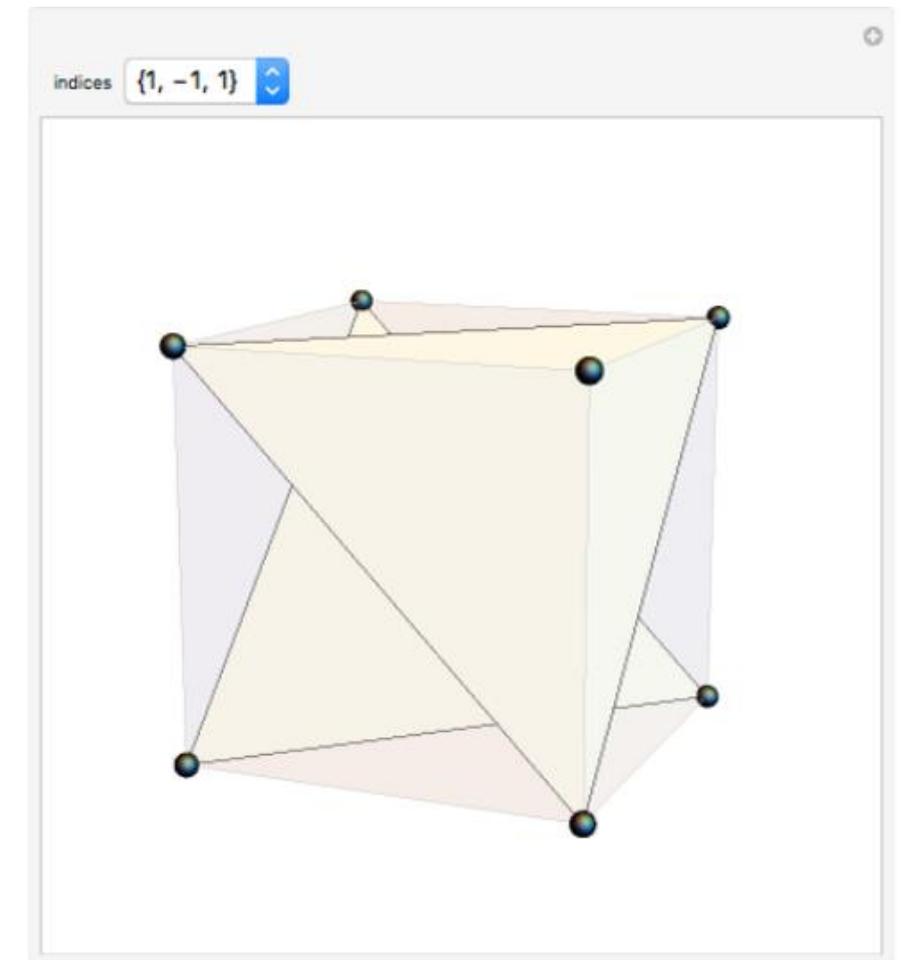
Parte B – Troca de conhecimentos

G1 demonstra para G2 e vice-versa

Documente as observações e compartilhe suas impressões.

Atividade Índices de Miller

1. Acesse o link presente no moodle da Atividade dos Índices de Miller
2. Veja todos os planos disponíveis



Atividade Lei de Bragg

1. Acesse o link presente no moodle da Atividade da Lei de Bragg
2. Escolha um comprimento de onda e distância interplanar
3. Ache os ângulos em que existe interferência construtiva e destrutiva (anote!)
4. Use a lei de Bragg para encontrar os ângulos de interferência construtiva
5. Verifique se a lei de Bragg vale no caso estudado

Atividade Lei de Bragg

