



### Teoria de grupos aplicada em moléculas e sólidos - PGF5261

Grupos e tensores aplicados à ciência dos materiais - 4300409



# Lucy V. C. Assalí

Instituto de Física Universidade de São Paulo

1º Semestre/2023





Dentro da aproximação de Born-Oppenheimer (BO), as propriedades dinâmicas da rede de um sistema são determinadas pela seguinte equação de Schrödinger

$$\left[-\sum_{I}\frac{\hbar^{2}}{2M_{I}}\frac{\partial^{2}}{\partial R_{I}^{2}}+\mathcal{E}_{BO}(\boldsymbol{R})\right]\phi(\boldsymbol{R})=E\phi(\boldsymbol{R})$$

energia do sistema eletrônico que se comporta como um operador energia potencial agindo sobre os núcleos ⇒ vínculo entre os sistemas eletrônico e nuclear e determina a superfície de energia potencial adiabática na geometria do sistema

A dinâmica dos valores médios dos operadores posição e momento dos núcleos pode ser obtida utilizando-se o teorema de Ehrenfest:

A aproximação de núcleo clássico consiste em identificar  $\langle \mathbf{R} \rangle = \mathbf{R}_{cl} \in \langle \nabla \mathcal{E}_n(\mathbf{R}) \rangle = \nabla \mathcal{E}_n(\mathbf{R}_{cl})$ . Isso pode ser entendido se a função de onda nuclear for representada como um produto de funções delta de Dirac cujos centros estão localizados nas posições clássicas. Então, dentro da aproximação clássica, as equações de movimento são

$$M \frac{d^2 \mathbf{R}_{cl}}{dt^2} = -\nabla \mathcal{E}_n(\mathbf{R}_{cl})$$
  
*n'*ésima superfície de energia potencial adiabática





- Ligações cristalinas (T=0K) ⇒ Os átomos do cristal estão sujeitos à um poço de potencial e permanecem fixos em suas posições de equilíbrio.
- Ligações cristalinas (T≠0K) ⇒ Os átomos vibram em torno de suas posições de equilíbrio e, em primeira aproximação, podemos dizer que eles vibram em um poço harmônico (MHS), apresentando certas frequências permitidas de oscilação.
- Poço de potencial dependente do tempo ⇒ O poço de potencial a que um átomo está sujeito é causado pela ligação dele com os átomos que estão ao seu redor, que por sua vez também estão vibrando em torno de suas posições de equilíbrio ⇒ o potencial a que um átomo da rede está sujeito é dependente do tempo, em função da vibração dos átomos vizinhos.
- Descrição simples das vibrações da rede ⇒ Supor que os átomos estão conectados entre si por molas ⇒ vibração de um deles implica na vibração dos demais (conjunto de átomos vibrando em torno de suas posições de equilíbrio).
- Vibrações da rede ⇒ são ondas elásticas e nosso objetivo é determinar as frequências de vibração das ondas da rede em termos dos vetores de onda que as caracterizam. Para isso vamos utilizar a aproximação de pequenas oscilações.





De modo geral, a força sobre certo átomo da rede, de massa *M*, de acordo com a lei de Hooke, é:

$$\vec{F}_{0} = M \frac{d^{2}}{dt^{2}} [\vec{\xi}_{0} - \vec{\ell}_{0}] = \sum_{\ell \neq 0}^{\infty} \sum_{i=1}^{3} \sum_{j=1}^{3} A_{\vec{\ell}ij} [\vec{\xi}_{\vec{\ell}i} - \vec{\ell}_{i}] \hat{e}_{j}$$
  
$$\vec{\xi}_{0} - \vec{\ell}_{0} = \vec{u}_{0} \implies \text{deslocamento do átomo} \text{em } \vec{\ell} = 0 \text{ em relação à} \text{sua posição de equilíbrio}$$
  
$$\text{coeficiente que dá a relação entre a força criada na direção ĵ quando o átomo situado no ponto  $\vec{\ell}$  da rede sofre um deslocamento na direção *î*$$

 $\Rightarrow \vec{\ell} \text{ é a posição de um átomo da rede e é definido por } \vec{\ell} = (\vec{\ell}_B, \vec{r}_j), \text{ com } \vec{\ell}_B = \text{ vetor de translação da rede de Bravais e } \vec{r}_j = \text{ vetores posição dos átomos da base}$ 





Uma maneira possível, e a mais indicada para se resolver a equação de movimento, é através da transformada de Fourier de seus dois membros. Entretanto, vamos resolvê-la, do modo como está definida, para o caso mais simples possível: unidimensional e interação somente entre primeiros vizinhos









Uma maneira possível, e a mais indicada para se resolver a equação de movimento, é através da transformada de Fourier de seus dois membros. Entretanto, vamos resolvê-la, do modo como está definida, para o caso mais simples possível: unidimensional e interação somente entre primeiros vizinhos



Para esse sistema, a equação de Hooke fica:







A equação que devemos resolver para o deslocamento  $u_0$  do átomo em  $\ell=0$  é

$$M\frac{d^2u_0}{dt^2} = C\{u_{-1} + u_1 - 2u_0\}$$

equações semelhantes para  $u_1$  em função de  $u_0$  e  $u_2$ , para  $u_{-1}$  em função de  $u_0$  e  $u_{-2}$ , ....

A solução não é simples, mas podemos utilizar o fato de que as vibrações da rede têm carácter ondulatório, apresentando modos normais de vibração e, para o caso da cadeia monoatômica unidimensional, escrever como solução

 $u(x,t) = \mathcal{U}\mathrm{e}^{i(kx-\omega t)}$ 

onde  $\omega$  é a frequência da onda e k é o seu número de onda  $(2\pi/\lambda)$ 

**OBS.:** Se levássemos em conta todos os átomos da cadeia:

$$M \frac{d^2 u_0}{dt^2} = -C \sum_{\ell \neq 0} \left( u_0 - u_\ell \right) \quad (\ell \text{ equações acopladas})$$





Vamos, agora, imaginar que a cadeia é finita e tem um comprimento L = Na, onde N é o número de átomos. Devemos, portanto, aplicar condições periódicas de contorno ou condições de Born-von Karman, representadas esquematicamente, de dois modos diferentes, nas figuras abaixo.



$$\Rightarrow u(x,t) = u(x + Na,t) \Rightarrow e^{i(kx - \omega t)} = e^{i[k(x + Na) - \omega t]} = e^{i(kx - \omega t)} e^{ikNa}$$
$$= 1$$
$$\therefore kNa = 2\pi n (n = \text{inteiro}) \Rightarrow \boxed{k = \frac{2\pi}{a} \frac{n}{N}}$$

Valores possíveis de  $k \implies$  são discretos e existem N deles, pois se k muda de um valor de  $\frac{2\pi}{a}$  o deslocamento do átomo é o mesmo e, também, o maior valor possível de k é  $\frac{2\pi}{a}$  (n = N), que é a dimensão da  $1^{\underline{a}}$  zona de Brillouin.





Voltando à equação do deslocamento do átomo em  $\ell = 0$  (1<sup>os</sup> vizinhos):

$$M\frac{d^2u_0}{dt^2} = C\{u_{-1} + u_1 - 2u_0\}$$

Usando  $u_0 = \mathcal{U}e^{i(kx-\omega t)}$ ,  $u_1 = \mathcal{U}e^{i(kx-\omega t)}e^{ika} = u_0e^{ika}$ ,  $u_{-1} = \mathcal{U}e^{i(kx-\omega t)}e^{-ika} = u_0e^{-ika}$ , temos

$$M\frac{d^2u_0}{dt^2} = -\omega^2 M u_0 = C\{u_0 e^{ika} + u_0 e^{-ika} - 2u_0\}$$

$$\Rightarrow -\omega^2 M = C\{\underbrace{\mathrm{e}^{ika} + \mathrm{e}^{-ika}}_{2\cos(ka)} - 2\} \Rightarrow \omega^2 = \frac{2C}{M}\{1 - \cos(ka)\}$$

 $\operatorname{Como \, sen}^2 \left[ \frac{ka}{2} \right] = \frac{1 - \cos(ka)}{2} \implies -\cos(ka) = 2\operatorname{sen}^2 \left[ \frac{ka}{2} \right] \implies \text{ a relação de dispersão fica:}$ 

$$\omega = \sqrt{\frac{4C}{M}} \left| \operatorname{sen}\left(\frac{ka}{2}\right) \right|$$



Como  $\omega$  é uma função par de k, é suficiente tomar-se somente a raiz positiva. Um movimento arbitrário da cadeia é determinado especificando-se as N posições e velocidades iniciais dos átomos. A figura mostra o gráfico da relação de dispersão







A primeira zona de Brillouin descreve as propriedades de vibração da rede sem necessidade de irmos mais além. Ao somarmos ou subtrairmos  $2\pi/a$ , ou múltiplos desse valor, o gráfico da relação entre  $\omega$  e k sofre somente uma translação, sem modificação no conceito físico. Os deslocamentos dos átomos descrevem ondas se propagando ao longo da cadeia de átomos, com velocidade de fase  $v_f = \omega/k$  e velocidade de grupo  $v_g = d\omega/dk$  (velocidade de transmissão de energia no meio).



#### Cadeia Diatômica: Massas diferentes e mesma constante de mola М М mМ Μ mmmm┡᠆{(((0))))}-�-{((0))))}-�-{((0))))}-�-{((0)))}-�-{((0)))}-С С С С C $v_{-1}$ $u_0$ $v_0$ $u_1$ $v_1$ $u_{-1}$

 $\ell = -1$  L = -1  $\ell = 0$  L = 0  $\ell = 1$  L = 1

Para este sistema, teremos uma equação de movimento para cada massa:



$$\implies \begin{cases} m(-\omega^2)u_0 = C \{v_0 + v_0 e^{-ika} - 2u_0\} \\ M(-\omega^2)v_0 = C \{u_0 + u_0 e^{-ika} - 2v_0\} \end{cases}$$

$$\implies \begin{cases} -m\omega^2 u_0 - C \left\{ v_0 \left[ 1 + e^{-ika} \right] - 2u_0 \right\} = 0 \\ -M\omega^2 v_0 - C \left\{ u_0 \left[ 1 + e^{-ika} \right] - 2v_0 \right\} = 0 \end{cases}$$

$$\begin{bmatrix} (2C - m\omega^2) & -C(1 + e^{-ika}) \\ C(1 + e^{ika}) & -(2C - M\omega^2) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_0 \\ v_0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

solução não trivial

$$\det \begin{vmatrix} (2C - m \,\omega^2) & -C \left(1 + e^{-ika}\right) \\ C \left(1 + e^{ika}\right) & - \left(2C - M \,\omega^2\right) \end{vmatrix} = 0$$







Resolvendo o determinante:

$$-(2C - m\omega^{2})(2C - M\omega^{2}) + C^{2}(1 + e^{-ika})(1 + e^{ika}) = 0$$

$$(2C - m\omega^{2})(2C - M\omega^{2}) = C^{2}\left[2 + \underbrace{e^{ika} + e^{-ika}}_{2\cos(ka)}\right] = C^{2}[4 - 4\sin^{2}(ka/2)] = 4C^{2}\cos^{2}(ka/2)$$

$$\implies 4C^2 - 2C(m+M)\omega^2 + mM\omega^4 - 4C^2\cos^2(ka/2) = 0$$
$$\implies mM\omega^4 - 2C(m+M)\omega^2 + 4C^2\left[1 - \cos^2(ka/2)\right] = 0$$

Usando a definição da massa reduzida do sistema  $\implies \mu = \frac{mM}{m+M}$ , a equação a ser resolvida é:

$$\omega^{4} - \frac{2C}{\mu} \,\omega^{2} + \frac{4C^{2}}{mM} \,\sin^{2}\left(ka/2\right) = 0$$

Cujas raízes são: 
$$\omega^2 = \frac{C}{\mu} \pm \frac{1}{2} \sqrt{\frac{4C^2}{\mu^2} - \frac{16C^2}{mM}} \operatorname{sen}^2(ka/2)$$



### Definindo s = 1 ou s = 2, temos

$$\omega_s^2 = \frac{C}{\mu} + \frac{(-1)^s}{2} \sqrt{\frac{4C^2}{\mu^2} \left[1 - \frac{4\mu^2}{mM} \operatorname{sen}^2\left(ka/2\right)\right]}$$

$$\implies \omega_s^2 = \frac{C}{\mu} \left\{ 1 + (-1)^s \sqrt{1 - \frac{4\mu^2}{mM} \operatorname{sen}^2 (ka/2)} \right\} \begin{bmatrix} p \\ a \\ \omega \end{bmatrix}$$

possíveis soluções para a relação de dispersão  $\omega(k)$  da onda

Para verificarmos a forma da função  $\omega(k) \times k$ , vamos examinar as soluções nos limites da 1<sup>a</sup> ZB:  $k \to 0$  e  $k = \pm \frac{\pi}{a}$ :

1. 
$$\underline{ka \ll 1 \text{ ou } k \to 0 \text{ ou } \lambda \gg a}$$
  
 $\operatorname{sen}^2(ka/2) \approx \frac{k^2 a^2}{4} \Rightarrow \omega_s^2 = \frac{C}{\mu} \left\{ 1 + (-1)^s \sqrt{1 - \frac{\mu^2 (k^2 a^2)}{mM}} \right\}$ 

tSP

Como  $ka \ll 1$ , vamos expandir a raiz em série de Taylor, pois para  $x \ll 1$  temos que

$$[1-x]^{1/2} \approx 1 - \frac{1}{2}x \Rightarrow \sqrt{1 - \frac{\mu^2 k^2 a^2}{mM}} \approx 1 - \frac{\mu^2 k^2 a^2}{2mM}$$

$$\Longrightarrow \omega_s^2 = \frac{C}{\mu} \left\{ 1 + (-1)^s \left[ 1 - \frac{\mu^2 \, k^2 \, a^2}{2mM} \right] \right\}$$

$$s = 1 \quad \Rightarrow \omega_{-}^{2} = \frac{C}{\mu} \left\{ 1 - 1 + \frac{\mu^{2} k^{2} a^{2}}{2mM} \right\} = \frac{C}{2(m+M)} k^{2} a^{2}$$
Relação linear
$$\Rightarrow \omega_{-} = ka \sqrt{\frac{C}{2(m+M)}} \qquad (\omega_{-} \propto k)$$

$$s = 2 \quad \Rightarrow \omega_{+}^{2} = \frac{C}{\mu} \left\{ 1 + 1 - \frac{\mu^{2} k^{2} a^{2}}{2mM} \right\} = \frac{C}{\mu} \left\{ 2 - \frac{\mu^{2} k^{2} a^{2}}{2mM} \right\}$$

$$constante$$

$$\Rightarrow \omega_{+} = \sqrt{\frac{2C}{\mu}} \qquad (\omega_{+} \text{ independe de } k)$$







relação de dispersão, no limite  $ka\ll 1$ 

2.  $k = \pm \pi/2$  ou  $ka = \pm \pi$ 

Nesse caso: sen<sup>2</sup>  $(ka/2) = 1 e \mu^2 = \frac{m^2 M^2}{(m+M)^2}$ 

$$\omega_s^2 = \frac{C}{\mu} \left\{ 1 + (-1)^s \sqrt{1 - \frac{4mM}{(m+M)^2}} \right\}$$

$$\frac{mM}{m+M} \frac{1}{\frac{1}{m+M}} \sqrt{(m+M)^2 - 4mM} = \frac{m-M}{m+M}$$

$$\implies \omega_s^2 = \frac{C}{(mM)} \left\{ (m+M) + (-1)^s (m-M) \right\}$$



Utilizando os resultados obtidos para  $k \to 0$  e  $k = \pm \pi/a$ , podemos fazer o gráfico da relação de dispersão para a cadeia diatômica, supondo M > m



Vamos encontrar, agora, os deslocamentos dos átomos:

1.  $ka \longrightarrow 0$  e  $\omega_{-} = 0$ :

$$\begin{bmatrix} 2C & -2C \\ 2C & -2C \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_0 \\ v_0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \Rightarrow \boxed{u_0 = v_0}$$

$$\implies \text{ Os átomos movem-se em fase}$$

2.  $ka \longrightarrow 0$  e  $\omega_+ = \sqrt{2C/\mu} = \sqrt{2C(m+M)/(mM)}$ :

$$\begin{bmatrix} 2C\left\{1 - \left[\frac{m+M}{M}\right]\right\} & -2C\\ 2C & -2C\left\{1 - \left[\frac{m+M}{m}\right]\right\} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_0\\ v_0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0\\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} -m/M & -1 \\ 1 & M/m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_0 \\ v_0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \Rightarrow \boxed{u_0 = -\frac{M}{m}v_0}$$

Os átomos vibram em sentidos opostos, mas o centro de massa permanece fixo







Interpretação:

 $k \rightarrow 0$  ou  $\lambda \gg a$  ( $\omega_{-} = 0 \rightarrow u_{0} = v_{0}$ ): Os átomos movem-se em fase e a relação de dispersão é linear ( $\omega \propto k$ ), como nas ondas sonoras  $\therefore$  modo de vibração chamado acústico.



 $k \rightarrow 0$  ou  $\lambda \gg a$  ( $\omega_{+} = \sqrt{\frac{2C}{\mu}} \rightarrow u_{0} = -\frac{M}{m}v_{0}$ ): Os átomos vibram em sentidos opostos, mas o centro de massa permanece fixo. A relação de dispersão é independe de k ( $\omega$  = constante), como nas oscilações do tipo dipolo elétrico, e ondas eletromagnéticas na região do infravermelho podem excitar este tipo de vibração da rede  $\therefore$  modo de vibração chamado óptico.







\* Para que  $\omega$  tenha valores reais, nesse intervalo, k deve ser complexo ( $e^{\pm kx}$ ) e a onda será amortecida no espaço, não representando vibrações.







As figuras mostram planos de átomos nas posições de equilíbrio (linhas pontilhadas) e os planos de átomos quando deslocados (linhas sólidas). u's representam deslocamentos dos planos.







<u>Cristais Tridimensionais</u>: Se existirem p átomos por célula primitiva, ocorrerão 3p ramos na relação de dispersão: 3 ramos acústicos e 3p-3 ramos óticos. Se a dimensão do cristal for d, o número total de ramos é dp, o número de ramos acústicos é d e o número de ramos óticos é pd – d.



Curvas de dispersão ao longo de uma direção qualquer do espaço k para uma rede tridimensional com uma base de dois átomos por célula primitiva. As três curvas vermelhas (ramos acústicos) são lineares para valores de k muito pequenos. As três curvas verdes (ramos ópticos) são quase horizontais, indicando que a interação intra-celular é muito mais forte que a entre as células.



### Quantização das Vibrações da Rede ou das Ondas Elásticas: Fônons



Para especificar a energia de um cristal harmônico composto por *N* íons, deve-se considerá-lo como 3*N* osciladores independentes. Cada modo de vibração, caracterizado por uma frequência, apresenta uma energia de vibração da rede que é quantizada. Um quantum de energia é chamado fônon, em analogia com o fóton para as ondas eletromagnéticas.

- > Ondas elásticas em um cristal  $\Rightarrow$  compostas por fônons
- $\succ$  Vibrações térmicas da rede  $\Rightarrow$  fônons excitados termicamente
- > A energia de um modo elástico de frequência  $\omega_{\vec{k},s}$  é  $\mathcal{E}_{\vec{k},s} = \left(n_{\vec{k},s} + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_{\vec{k},s}$ (OH quântico)

 $n_{\vec{k},s} \Rightarrow$  número de excitação do modo normal com vetor de onda  $\vec{k}$  no ramo *s* e é restrito aos valores 0,1,2,... Quando o modo normal do ramo *s* com vetor de onda  $\vec{k}$  está em seu  $n_{\vec{k},s}$ 'ésimo estado excitado, diz-se que existem  $n_{\vec{k},s}$  fônons do tipo *s* com vetor de onda  $\vec{k}$  presentes no cristal, ou que o modo está ocupado por  $n_{\vec{k},s}$  fônons. O termo  $(1/2)\hbar\omega_{\vec{k},s}$  é a energia de ponto zero do modo e cada modo de vibração é um oscilador que estará excitado a um nível de energia  $n_{\vec{k},s}\hbar\omega_{\vec{k},s}(\vec{k})$ , ou seja, cada modo contém *n* fônos de energia  $\hbar\omega$ . Um estado do cristal inteiro é especificado fornecendo os números de excitação para cada um dos 3*N* modos normais e a energia total é apenas a soma das energias dos modos normais individuais:

$$U = \sum_{\vec{k},s} \left( n_{\vec{k},s} + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_{\vec{k},s}$$

Fônon: quanta do campo de deslocamento iônico que, para um intervalo apropriado de frequência, descreve o som clássico







Lucy V.C. Assali

Supondo que o sistema é composto por *N* osciladores harmônicos idênticos e em equilíbrio térmico, a probabilidade de excitação de um modo de vibração que contém *n* fônons é proporcional ao fator de Boltzman

$$e^{-\beta n\hbar\omega}$$
 ( $\beta = \frac{1}{k_B T}$  e  $k_B$  = constante de Boltzman)

Utilizando a distribuição de Planck, podemos encontrar a fração do número total de osciladores no estado quântico *n* através da expressão da probabilidade do modo de frequência  $\omega$  conter *n* fônons:

$$P = \frac{n \mathrm{e}^{-\beta n \hbar \omega}}{\sum_{n=0}^{\infty} \mathrm{e}^{-\beta n \hbar \omega}}$$

Com isso, o valor médio do número de fônons no modo de frequência  $\omega$  é







Seja  $x = \beta \hbar \omega$ , então







número médio de ocupação de fônons no modo normal com frequência  $\omega$ 

energia total do sistema no equilíbrio térmico







 $\Rightarrow \beta \hbar \omega \ll 1 \Rightarrow \hbar \omega \ll k_B T$  (temperaturas altas ou frequências baixas)

Limite onde  $\frac{k_B T}{\hbar} \gg$  que todas as frequências  $\omega_{\vec{k},s}$  dos fônons (todos altamente excitados)

$$\Rightarrow e^{\beta \hbar \omega} = 1 + \beta \hbar \omega + \frac{(\beta \hbar \omega)^2}{2} + \dots \cong 1 + \beta \hbar \omega$$

$$\implies \langle \mathcal{E}_n \rangle = \frac{\hbar\omega}{\mathrm{e}^{\beta\hbar\omega} - 1} \cong \frac{\hbar\omega}{1 + \beta\hbar\omega - 1} = k_B T$$

$$\implies \langle n \rangle = \frac{1}{\mathrm{e}^{\beta \hbar \omega} - 1} \cong \frac{1}{1 + \beta \hbar \omega - 1} = \frac{k_B T}{\hbar \omega} \rightarrow \infty$$

No limite de altas temperaturas, o número médio de fônons ocupando o modo com frequência  $\omega$  é grande o suficiente para que sua energia média seja ~  $k_BT$ .







 $\Rightarrow \beta \hbar \omega \gg 1 \Rightarrow \hbar \omega \gg k_B T$  (temperaturas baixas ou frequências altas)

$$\Rightarrow \langle n \rangle = \frac{1}{\mathrm{e}^{\beta \hbar \omega} - 1} \cong \mathrm{e}^{-\beta \hbar \omega} \ll 1 \Rightarrow \langle n \rangle \ll 1$$

$$\Rightarrow \langle \mathcal{E}_n \rangle = \langle n \rangle \hbar \omega \cong e^{-\beta \hbar \omega} \hbar \omega \left[ \frac{k_B T}{k_B T} \right] = \underbrace{e^{-\beta \hbar \omega} \beta \hbar \omega}_{\ll 1} k_B T \Rightarrow \langle \mathcal{E}_n \rangle \ll k_B T$$

No limite de baixas temperaturas, o número médio de fônons ocupando o modo com frequência  $\omega$  é praticamente nulo, sendo que sua energia média é  $\ll k_B T$ .

Podemos dizer que, de certa maneira, os modos com  $\hbar\omega \le k_B T$  estão com energia  $\approx k_B T$  e <u>ocupados</u>, enquanto que aqueles com  $\hbar\omega > k_B T$  estão <u>vazios</u>.







É possível extrair de forma detalhada as relações de dispersão  $\omega(\vec{k})$  dos modos normais de experimentos nos quais as vibrações da rede trocam energia com uma sonda externa.

Vimos que a energia de um nêutron para  $\lambda \sim 1 \text{ Å} \in E \approx 0,08 \text{ eV}$ , que são obtidos em reatores e a principal interação deles é com os núcleos dos átomos dos cristais. Assim, um feixe de nêutrons é a mais informativa das sondas para estudar fônons.

A energia perdida (ganha) por um nêutron ao interagir com um cristal é interpretada como sendo devida à emissão (absorção) de fônons. Medindo os ângulos emergentes e as energias dos nêutrons espalhados pode-se extrair informações diretas sobre o espectro de fônons. Informações semelhantes podem ser obtidas quando a sonda é uma radiação eletromagnética, sendo os casos mais importantes os raios-X e a luz visível. Os princípios gerais a esses experimentos são os mesmos, sejam as partículas incidentes nêutrons ou fótons, mas as informações extraídas de sondas eletromagnéticas são geralmente mais limitadas ou mais difíceis de interpretar.









Curvas de dispersão do KBr a 90K obtidas por espectrometria de nêutrons\*. A extrapolação para  $k \rightarrow 0$  dos ramos LA (longitudinal acústico) e TA (transversal acústico) apresenta relação de dispersão linear e a extrapolação para k = 0 dos ramos TO (transversal ótico) e LO (longitudinal óptico) são chamados  $\omega_{\rm T}$  e  $\omega_{\rm L}$ 

\*A. D. B. Woods, B. N. Brockhouse, R. A. Cowley e W. Cochran Phys. Rev. **131**, 1025 (1963). 影







Típica curva de dispersão para as frequências normais de vibração de uma rede de Bravais CFC monoatômica. As curvas são para o Fe (Brockhouse *et al.* Phys. Rev. **128**, 1099 (1962).)







MgO e CaO  $\Rightarrow$  apresentam as estruturas cristalinas do tipo NaCl (CFC – B<sub>1</sub>) e do tipo CsCl (CS – B<sub>2</sub>), dependendo da pressão.



Ambas estruturas apresentam uma base com 2 átomos  $\Rightarrow$  número de ramos = (2)(3) = 6, sendo 3 ramos acústicos e 3 ramos ópticos



