

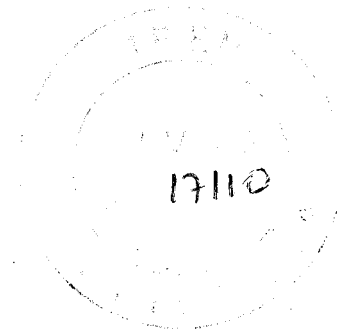
INSTITUTO DE PESQUISAS ENERGÉTICAS E NUCLEARES
SECRETARIA DA INDÚSTRIA, COMÉRCIO, CIÊNCIA E TECNOLOGIA
AUTARQUIA ASSOCIADA À UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

**ESTUDOS DA DINÂMICA DE REDE DO ALUMÍNIO POR MEIO DE
ESPALHAMENTO INELÁSTICO DE NÊUTRONS**

João Batista Veiga Salles Filho

Dissertação apresentada ao Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares como parte dos requisitos para a obtenção do grau de "Mestre na Área de Concentração em Tecnologia Nuclear".

Orientador: Dr. Roberto Fulfaro



SÃO PAULO
1982

A

Eliana, Paula e Heloisa

AGRADECIMENTOS

Desejo expressar meus agradecimentos a todas as pessoas que direta ou indiretamente colaboraram para o desenvolvimento do presente trabalho, e em particular:

Dr. Roberto Fulfaro, pela orientação e dedicação em todas as fases do presente trabalho;

Dr. Laercio Antonio Vinhas, Gerente da Área de Física Nuclear, pelo apoio mostrado;

Colegas do Grupo de Espalhamento de Nêutrons;

Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, pelo suporte material e financeiro;

Srta. Thereza Timo Iaria, pelo trabalho de datilografia.

ESTUDOS DA DINÂMICA DE REDE DO ALUMÍNIO POR MEIO DO ESPALHAMENTO INELÁSTICO DE NÊUTRONS

JOAO BATISTA VEIGA SALLES FILHO

RESUMO

Foram medidas para a temperatura de 300K, as relações de dispersão do alumínio nas direções de mais alta simetria do cristal, utilizando o espectrômetro de três eixos do IPEN. Os resultados mostraram-se precisos, com excelente concordância com alguns dados já existentes na literatura. Os cálculos teóricos das relações de dispersão foram efetuados com base nos modelos de dinâmica de redes de Born-von Karman e Axialmente Simétrico, tendo sido incluídas as interações até as cinco camadas de átomos mais próximas.

Os cálculos das constantes elásticas do alumínio foram efetuados a partir de valores da velocidade de propagação do som obtidos diretamente das curvas de dispersão, ao longo de certas direções de simetria do cristal. Por meio de aplicações dos modelos teóricos foram determinadas as constantes de força do alumínio, a partir das quais podem ser obtidas várias propriedades físicas desse metal.

LATTICE DYNAMICS OF ALUMINUM STUDIED BY NEUTRON INELASTIC SCATTERING

JOAO BATISTA VEIGA SALLES FILHO

A B S T R A C T

Measurements of phonon dispersion relations of aluminum along the high symmetry directions were performed by coherent inelastic scattering of thermal neutrons technique. All measurements were taken at room temperature using the IPEN triple axis neutron spectrometer. The results obtained with accuracy are in good agreement with the published data.

The dispersion relations were calculated theoretically within the framework of Born-von Karman and Axially Symmetric models, including interactions up to the fifth nearest shell of atoms.

The elastic constants were determined using the values of sound propagating velocity obtained directly from the dispersion relations along of high symmetry directions of the crystal. Applying theoretical models the force constants of aluminum were also determined. From these data several physical properties of the metal can be obtained.

ÍNDICE

PÁGINA

I.	INTRODUÇÃO	01
II.	CONSIDERAÇÕES TEÓRICAS	04
II.1-	APROXIMAÇÃO ADIABÁTICA	04
II.2-	MODELO BORN-VON KARMAN	05
II.3-	MODELO AXIALMENTE SIMÉTRICO	09
II.4-	SIMETRIA DA REDE CRISTALINA	11
II.4.1-	MODOS DE ALTA SIMETRIA NUMA REDE CÚBICA DE FACES CENTRADAS	12
II.5-	MATRIZ DINÂMICA PARA VIBRAÇÕES EM UM MEIO CON TINUO COM SIMETRIA CÚBICA	13
II.6-	INTERAÇÃO DE NÊUTRONS LENTOS COM A MATÉRIA	17
II.6.1-	INTRODUÇÃO	17
II.6.2-	ESPALHAMENTO COERENTE INELÁSTICO DE UM FONON	20
III.	ARRANJO EXPERIMENTAL E MÉTODO DE MEDIDA	25
III.1-	ARRANJO EXPERIMENTAL	25
III.2-	MÉTODO DE MEDIDA	27
III.3-	ORIENTAÇÃO DA AMOSTRA	32
IV.	RESULTADOS EXPERIMENTAIS E ANÁLISE DOS DADOS	34
IV.1-	RESULTADOS EXPERIMENTAIS	34
IV.2-	ANÁLISE DOS RESULTADOS EXPERIMENTAIS	36
IV.2.1-	CÁLCULO DA VELOCIDADE DE PROPAGAÇÃO DO SOM E DAS CONSTANTES ELÁSTICAS DO ALUMÍNIO, A PARTIR DAS CURVAS DE RELAÇÃO DE DISPERSÃO MEDIDAS EXPERIMENTALMENTE	39
IV.3-	DETERMINAÇÃO DAS CONSTANTES DE FORÇA	42
V.	CONCLUSÕES	63

PAGINA

APÊNDICE I	66
A.I.1- REDE RECÍPROCA E PRIMEIRA ZONA DE BRILLOUIN DE UM CRISTAL CÚBICO DE FACES CENTRADAS	66
A.I.2- FATÓR DE ESTRUTURA PARA REDE (FCC)	67
APÊNDICE II	69
A.II.1- CONDIÇÕES DE FOCALIZAÇÃO PARA MEDIDAS DE PICOS DE FONONS	69
A.II.2- APLICAÇÃO DAS CONDIÇÕES DE FOCALIZAÇÃO AO ES PECTRÔMETRO DE TRÊS EIXOS DO IPEN PARA A MEDI DA DA CURVA DE RELAÇÃO DE DISPERSÃO DO ALUMÍ- NIO NAS DIREÇÕES ($\xi\xi 0$) E (00ξ)	74
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	80

I. INTRODUÇÃO

Quando os átomos em um sólido executam pequenas oscilações em torno de suas posições de equilíbrio, ocorrem as vibrações da rede ocasionadas pela excitação térmica. Para um sólido cristalino com N átomos, são permitidos $3N$ modos normais de vibração e o sistema é descrito por ondas planas. O movimento ondulatorio é quantizado, sendo o quantum associado a um modo normal considerado como uma excitação elementar da rede cristalina conhecida como fonon.

A relação entre a frequência e o vetor de onda das vibrações cristalinas, $\omega = \omega(\vec{q})$, é denominada relação de dispersão. Para um cristal com um átomo por célula unitária, a relação de dispersão, quando medida ao longo de direções selecionadas no espaço dos vetores de onda, corresponde a um conjunto de curvas com três ramos. No caso de ondas que se propagam ao longo das direções de mais alta simetria da rede, todos os deslocamentos ocorrem de maneira exatamente paralela ou perpendicular à direção de propagação em virtude de condição imposta pela simetria do cristal. Tais casos correspondem a modos puros de vibração. Uma completa determinação da relação de dispersão envolve não somente a determinação das frequências mas também uma identificação dos ramos de acordo com sua polarização.

O conhecimento da relação de dispersão é muito importante para o entendimento de muitas propriedades físicas dos sólidos, como por exemplo, velocidade de propagação do som, constantes de força e constantes elásticas. Além disso, a relação de dispersão fornece a informação experimental necessária para o ensaio de vários modelos teóricos sobre dinâmica de redes.

As frequências dos fonons (frequências de vibração da rede) podem ser medidas por várias técnicas, porém a mais comumente usada é a que utiliza o espalhamento coerente inelástico de nêutrons por uma amostra monocristalina⁽³⁾.

Nas investigações sobre o comportamento dinâmico dos sistemas sólidos, os nêutrons lentos obtidos de feixes emergentes

tes de reatores nucleares, são freqüentemente utilizados como partículas de prova, porque possuem energias da mesma ordem de grandeza das energias térmicas dos átomos na matéria e comprimentos de onda de Broglie com valores próximos às distâncias interatômicas nos materiais. Dessa forma, a partir de estudos de espalhamento de nêutrons por um sistema espalhador, podem ser obtidas várias informações sobre os estados dinâmicos desse sistema. As medidas das trocas de energia e quantidade de movimento entre o nêutron e o material amostra, conduzem diretamente ao conhecimento de parâmetros relacionados com as excitações fundamentais, como por exemplo fonons em um cristal⁽⁴⁾.

O conjunto completo das freqüências dos fonons constitui a relação de dispersão, sendo grande o interesse no desenvolvimento de métodos de medidas e cálculos relacionados com a obtenção experimental da relação de dispersão. Inegavelmente, um dos métodos mais adequados para realização desses experimentos é aquele que utiliza o Espectrômetro de Cristal de Três Eixos para nêutrons⁽³⁾, cujo princípio de operação está baseado no espalhamento coerente inelástico de nêutrons lentos por uma amostra sólida cristalina. Por meio desse instrumento faz-se incidir sobre a amostra um feixe de nêutrons lentos e efetua-se a medida das trocas de energia e quantidade de movimento entre o nêutron e o sólido. A sistematização desse procedimento permite a determinação direta da freqüência e do vetor de onda para os fonons na amostra, obtendo-se conseqüentemente as relações de dispersão.

A Área de Física Nuclear do IPEN é responsável pelo desenvolvimento de um programa de pesquisa sobre espalhamento inelástico de nêutrons lentos. Como parte desse programa já foram anteriormente desenvolvidos vários trabalhos científicos, como por exemplo: projeto, construção e calibração de um Espectrômetro de Cristal de Três Eixos⁽⁷⁾ e verificação do desempenho por meio de medidas da relação de dispersão do cobre^(6,7). Os objetivos desses trabalhos foram o de apresentar as principais características do instrumento e revelar pormenores, dificuldades e soluções encontradas durante a construção bem como adquirir o domínio das técnicas experimentais.

Atualmente, no que concerne ao desenvolvimento do programa de estudo de dinâmica de redes, o principal interesse da

Área de Física Nuclear do IPEN, é a obtenção de conhecimentos no campo de tratamento de dados experimentais e aplicação de modelos teóricos para a obtenção das propriedades físicas dos sólidos em estudo.

Nessas condições, a partir dos resultados experimentais da relação de dispersão de uma amostra monocristalina de alumínio, foi desenvolvido o estudo da presente dissertação com o objetivo de desenvolver um trabalho que permita o perfeito entendimento dos modelos teóricos e suas aplicações ao estudo de dinâmica de redes.

No Capítulo II são feitas considerações teóricas sobre os principais modelos de vibrações de redes cristalinas de metais, a saber Born-von Karman e Axialmente Simétrico, bem como a construção da matriz dinâmica para vibrações em um meio contínuo. É apresentada também a parte teórica sobre a interação de nêutrons lentos com a matéria.

A descrição do arranjo experimental e do método de medida está apresentada no Capítulo III.

No Capítulo IV é feita a apresentação e análise dos resultados experimentais com a aplicação dos modelos teóricos para a determinação da função que permite o cálculo da relação de dispersão para o alumínio. As conclusões são apresentadas no Capítulo V.

II. CONSIDERAÇÕES TEÓRICAS

No estudo de certas propriedades importantes de um sólido, como por exemplo, constantes elásticas, calor específico, expansão térmica e várias outras, é essencial se considerar as vibrações atômicas da rede cristalina.

O modelo teórico que apresenta a idéia mais simples para esses tipos de estudo é o modelo de Einstein, no qual cada átomo vibra como um oscilador harmônico simples em torno da posição na qual a energia potencial, devido à interação com seus vizinhos, é mínima. De uma maneira geral, essa aproximação harmônica é razoável, embora o poço de potencial não seja quadrático em função da distância, nem apresente simetria esférica. A aplicação do modelo gera um espectro de vibrações do cristal constituído por níveis espaçados pela energia $h\nu_E$, onde ν_E é a frequência de Einstein, ou seja, a frequência de vibração dos átomos em seus poços de potencial.

Este modelo é útil em alguns problemas mais simples, onde basta uma descrição aproximada das vibrações, especialmente casos de temperaturas relativamente altas, quando se justifica a hipótese de átomos distintos vibrando independentemente.

Para se considerar o movimento coletivo dos átomos no estudo da dinâmica de redes cristalinas são utilizados modelos mais completos onde são consideradas as correlações entre os movimentos de átomos adjacentes. Esses modelos foram originalmente discutidos nos trabalhos de Debye, Born, von Karman⁽²⁾ e muitos outros autores. De uma maneira geral os modelos consideram as forças locais e procuram descrever o movimento de uma maneira completa. A aplicabilidade dos modelos só se torna possível em virtude da invariância translacional da rede.

II.1- APROXIMAÇÃO ADIABÁTICA

A presença de um gás de elétrons de valência em um sólido pode ser considerada utilizando a chamada "aproximação adiabá

tica"⁽¹⁵⁾, na qual os elétrons ajustam-se adiabaticamente aos movimentos iônicos. A base física da aproximação considera que os íons possuem massa maior e movem-se mais lentamente que os elétrons. Portanto, do ponto de vista eletrônico, toda configuração iônica pode ser suposta como se os íons estivessem fixos. Uma consequência da aproximação é que a energia do gás de elétrons atua como energia potencial para o movimento dos íons. Para se considerar a energia potencial total (da interação íon-íon mais aquela correspondente ao gás de elétrons), geralmente é utilizado o modelo da aproximação harmônica, que será tratado a seguir.

II.2- MODELO BORN-VON KARMAN

Esse modelo considera forças tensoriais e é desenvolvido tomando por base a aproximação harmônica. Consideraremos a aproximação harmônica para o caso de sólidos que contenham um átomo por célula, como é o caso do alumínio, de que trata o presente trabalho.

Sendo \vec{a} , \vec{b} e \vec{c} os vetores primitivos de translação da rede, indica-se as posições de equilíbrio por:

$$\vec{\ell} = n\vec{a} + m\vec{b} + p\vec{c} \quad (\text{II.2.1})$$

onde n , m e p são números inteiros.

O deslocamento do ℓ -ésimo átomo a partir de seu ponto de equilíbrio é indicado por \vec{u}_ℓ , desse modo o vetor posição do ℓ -ésimo átomo torna-se

$$\vec{R}_\ell = \vec{\ell} + \vec{u}_\ell \quad (\text{II.2.2})$$

A energia cinética total da rede de átomos pode ser escrita como

$$T = \frac{1}{2} \sum_{\ell} \sum_{\alpha} M \dot{u}_{\ell}^{\alpha} \dot{u}_{\ell}^{\alpha} \quad (\text{II.2.3})$$

onde α representa x , y ou z , M é a massa do átomo e μ_ℓ^α é a componente cartesiana α de $\vec{\mu}_\ell$.

Definindo ϕ como o potencial de muitos corpos que governa o movimento dos íons e expandindo-o em série de potências dos deslocamentos $\vec{\mu}_\ell$, fica-se com:

$$\phi = \phi_0 + \sum_{\ell} \sum_{\alpha} \phi_{\alpha}(\vec{\ell}) \mu_{\ell}^{\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{\ell, \ell'} \sum_{\alpha, \beta} \phi_{\alpha\beta}(\vec{\ell}, \vec{\ell}') \mu_{\ell}^{\alpha} \mu_{\ell'}^{\beta} + \dots \quad (\text{II.2.4})$$

onde ϕ_0 é o potencial de equilíbrio, ou seja, aquele correspondente a uma rede estática de átomos e portanto, pode ser tomado igual a zero,

$$\phi_{\alpha}(\vec{\ell}) = \left[\frac{\partial \phi}{\partial \mu_{\ell}^{\alpha}} \right]_0 \quad (\text{II.2.5})$$

$$\phi_{\alpha\beta}(\vec{\ell}, \vec{\ell}') = \left[\frac{\partial^2 \phi}{\partial \mu_{\ell}^{\alpha} \partial \mu_{\ell'}^{\beta}} \right]_0 \quad (\text{II.2.6})$$

O subscrito zero significa que as derivadas são calculadas na configuração de equilíbrio, ou seja, nos sítios da rede estática. Nas posições de equilíbrio, onde a força de restauração é zero, o segundo termo do segundo membro da equação (II.2.4) se anula. A aplicação da condição de invariância translacional da rede permite reescrever $\phi_{\alpha\beta}(\vec{\ell}, \vec{\ell}')$ na seguinte forma:

$$\phi_{\alpha\beta}(\vec{\ell}, \vec{\ell}') = \phi_{\beta\alpha}(\vec{\ell}, \vec{\ell}') = \phi_{\alpha\beta}(\vec{\ell} - \vec{\ell}') \quad (\text{II.2.7})$$

e

$$\sum_{\ell'} \phi_{\alpha\beta}(\vec{\ell}, \vec{\ell}') = 0 \quad (\text{II.2.8})$$

A equação (II.2.8) expressa o fato de que a força resultante em um átomo qualquer é zero se cada átomo do sólido é des

locado do equilíbrio por um vetor deslocamento de mesmo valor.

Na aproximação harmônica, a série (II.2.4) que representa a função potencial é interrompida no termo harmônico, ou seja, no terceiro termo do segundo membro e assim sendo, as equações de movimento dos átomos na rede cristalina podem ser escritas da seguinte forma:

$$M\ddot{\mu}_\ell^\alpha = - \sum_{\ell'} \sum_{\beta} \phi_{\alpha\beta}(\vec{\ell}-\vec{\ell}') \mu_{\ell'}^\beta, \quad (\text{II.2.9})$$

Para não levar em conta efeitos de superfície, são estabelecidas condições periódicas de contorno onde o cristal com seus N átomos, é parte de um cristal infinito composto de cristais vibrando de modo idêntico ao considerado.

Define-se coordenadas normais Q_q por

$$\mu_\ell^\alpha = \frac{1}{(NM)^{1/2}} \sum_q e_q^\alpha Q_q^\alpha e^{i\vec{q}\cdot\vec{\ell}} \quad (\text{II.2.10})$$

onde \vec{q} são os N vetores permitidos⁽²¹⁾ que se situam dentro da primeira zona de Brillouin e \vec{e}_q são os vetores de polarização a serem melhor discutidos posteriormente. As construções da rede recíproca e da primeira zona de Brillouin estão descritas no Apêndice I, deste trabalho.

Substituindo (II.2.10) na equação (II.2.9), fica-se com:

$$- \ddot{Q}_q^\alpha e_q^\alpha = Q_q^\alpha \sum_{\beta} D_{\alpha\beta}(\vec{q}) e_q^\beta \quad (\text{II.2.11})$$

onde $D_{\alpha\beta}(\vec{q})$ é um elemento da matriz dinâmica $D(\vec{q})$ dado por:

$$D_{\alpha\beta}(\vec{q}) = \frac{1}{M} \sum_{\ell} \phi_{\alpha\beta}(\vec{\ell}) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{\ell}} \quad (\text{II.2.12})$$

As frequências das ondas descritas por Q_q são obtidas a partir da equação de autovalores para os vetores de polarização \vec{e}_q

$$\sum_{\beta} D_{\alpha\beta}(\vec{q}) e_q^{\beta} = \omega^2 e_q^{\alpha} \quad (\text{II.2.13})$$

Os três autovetores de $[D(\vec{q})]$ e as correspondentes coordenadas normais são indicadas por $\vec{e}_{q\sigma}$ e $Q_{q\sigma}$ ($\sigma = 1, 2, 3$).

Para considerar explicitamente a polarização, a equação (II.2.10) deve ser modificada e escrita na forma:

$$\vec{u}_{\ell} = \frac{1}{(NM)^{1/2}} \sum_{q,\sigma} Q_{q\sigma} \vec{e}_{q\sigma} e^{i\vec{q} \cdot \vec{\ell}} \quad (\text{II.2.14})$$

O hamiltoniano que corresponde às equações de movimento (II.2.9), ou a equivalente (II.2.11), pode ser escrito na forma diagonal⁽⁹⁾:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{q,\sigma} \left[\dot{Q}_{q\sigma}^* \dot{Q}_{q\sigma} + Q_{q\sigma}^* Q_{q\sigma} \omega^2(\vec{q}, \sigma) \right] \quad (\text{II.2.15})$$

onde

$$\omega^2(\vec{q}, \sigma) = (\vec{e}_{q\sigma} | D(\vec{q}) | \vec{e}_{q\sigma}) = \sum_{\alpha\beta} e_{q\sigma}^{\alpha} D_{\alpha\beta}(\vec{q}) e_{q\sigma}^{\beta} \quad (\text{II.2.16})$$

Da definição de $D(\vec{q})$, equação (II.2.12), verifica-se que⁽¹⁾ :

$$D(\vec{q} + \vec{G}) = D(\vec{q})$$

onde \vec{G} é um vetor da rede recíproca. Portanto $\omega^2(\vec{q})$ é periódico na rede recíproca com período \vec{G} .

Como já foi mencionado, pode-se escrever a energia potencial de um sólido como a soma de potenciais de pares $\phi(\vec{\ell}_1 - \vec{\ell}_2)$, dependente somente da distância entre os íons. Assim, escreve-se as constantes de força interatômicas $\phi_{\alpha\beta}(\vec{\ell})$ na forma:

$$\phi_{\alpha\beta}(\vec{\ell}) = - \left[\frac{\partial^2 \phi}{\partial \mu_{\ell}^{\alpha} \partial \mu_{\ell}^{\beta}} \right]_0 \quad (\text{II.2.18})$$

Usando este resultado na definição (II.2.12) da matriz dinâmica, tem-se:

$$D_{\alpha\beta}(\vec{q}) = \frac{1}{M} \sum_{\vec{\ell}}' (1 - e^{-i\vec{q} \cdot \vec{\ell}}) \left[\frac{\partial^2 \phi}{\partial \mu_{\ell}^{\alpha} \partial \mu_{\ell}^{\beta}} \right]_0 \quad (\text{II.2.19})$$

onde o apóstrofo na somatória de (II.2.19) indica que o termo $\vec{\ell} = 0$ deve ser omitido, como será visto em seguida. Este é o resultado básico para a matriz dinâmica em termos da lei de forças.

No modelo Born-von Karman, a interação harmônica entre dois átomos é descrita por uma matriz de constantes de força tensoriais⁽¹⁸⁾ na forma:

$$\phi_{\alpha\beta}^S = \begin{bmatrix} \alpha_1^S & & \beta_3^S & & \beta_2^S \\ & \beta_3^S & & \alpha_2^S & \beta_1^S \\ \beta_3^S & & \alpha_2^S & & \beta_1^S \\ & \beta_2^S & & \beta_1^S & \alpha_3^S \\ \beta_2^S & & \beta_1^S & & \alpha_3^S \end{bmatrix} \quad (\text{II.2.20})$$

onde $\phi_{\alpha\beta}^S$ é a força atuando em um átomo na origem ($\vec{\ell} = 0$) ao longo da direção "α" quando o "S-ésimo" átomo vizinho move-se de uma distância unitária ao longo da direção "β".

A expressão (II.2.20) é a forma geral das forças tensoriais.

A matriz (II.2.20) será usada na expressão (II.2.19) para, a partir desta se calcular a função $\omega(\vec{q})$, frequência das vibrações cristalinas de um sólido no modelo de Born-von Karman.

II.3- MODELO AXIALMENTE SIMÉTRICO ⁽¹⁴⁾

No modelo axialmente simétrico, o potencial de interação entre dois átomos que se deslocam da posição de equilíbrio em um sólido cristalino é suposto consistir de dois termos quadráticos, a saber: o primeiro proporcional ao quadrado da componente do deslocamento relativo ao longo da direção do vetor $\vec{\ell}$ que une

as posições de equilíbrio dos dois átomos e que causa uma força central ou força na direção da "ligação radial"; o segundo termo sendo proporcional ao quadrado da componente do deslocamento relativo perpendicular a $\vec{\ell}$ e que causa uma força na direção da "ligação angular". Tendo em vista que se pode supor equivalentes todas as direções no plano perpendicular a $\vec{\ell}$, o potencial de interação e as correspondentes forças podem ser considerados axialmente simétricos.

Se $V(|\vec{\ell}|)$ indica a energia potencial de interação entre dois íons separados pela distância $|\vec{\ell}|$, pode-se escrever:

$$V(|\vec{\ell} + \vec{\delta}|) = V(\ell) + V'(\ell) \frac{(\vec{\delta} \cdot \vec{\ell})}{\ell} + \frac{1}{2} V''(\ell) \frac{(\vec{\delta} \times \vec{\ell})^2}{\ell^3} + \frac{1}{2} V''(\ell) \frac{(\vec{\delta} \cdot \vec{\ell})^2}{\ell^3} + \text{termos de ordem mais alta em } \vec{\delta} \quad (\text{II.3.1})$$

onde ℓ é o módulo de $\vec{\ell}$, $\vec{\delta}$ é um vetor deslocamento arbitrariamente pequeno e os "apóstrofes" em $V(\ell)$ indicam diferenciação com respeito a ℓ . Os termos que apresentam potência maior que dois em $\vec{\delta}$ serão desprezados. O termo linear em $\vec{\delta}$ na equação (II.3.1) deve ser levado em consideração quando se considera a estabilidade estática da rede cristalina mas pode ser desprezado na determinação das frequências dos modos de vibração dos átomos no sólido. O terceiro e quarto termos na equação (II.3.1) são as contribuições da ligação na "direção angular" e "direção radial", respectivamente.

A matriz das constantes de força axialmente simétricas pode se referir a um sistema no qual um eixo principal, por exemplo o eixo X, coincide com a linha unindo os dois átomos e, nesse sistema, a matriz terá a seguinte forma:

$$\phi_{\alpha\beta}^S = \begin{bmatrix} A^S & 0 & 0 \\ 0 & B^S & 0 \\ 0 & 0 & B^S \end{bmatrix} \quad (\text{II.3.2})$$

onde $\phi_{\alpha\beta}^S$ já foi definido anteriormente.

A matriz (II.3.2) será utilizada para o cálculo da matriz dinâmica (II.2.19) no modelo axialmente simétrico, para que, a partir desta seja possível, no referido modelo, o cálculo das frequências dos modos de vibração da rede cristalina.

A discussão apresentada dos modelos Born-von Karman e Axialmente Simétrico, mostra claramente as semelhanças de cálculo entre eles e evidencia também uma matriz de constantes de força no modelo Axialmente Simétrico bastante simplificada em relação à mesma no modelo Born-von Karman. Isto significa que no caso geral da interação de um dado átomo com seus n -ésimos vizinhos mais próximos, são necessárias seis constantes de força Born-von Karman para representar a interação, ao passo que no modelo Axialmente Simétrico são necessárias apenas duas. Vê-se então que para representar a interação de um dado átomo com todos os seus n átomos vizinhos mais próximos, o modelo Axialmente Simétrico apresenta grande vantagem, desde que o sólido permita a aproximação de simetria axial para o potencial de interação.

Ainda sobre as constantes de força do modelo Born-von Karman, quando a camada de átomos possui estes em direção de simetria da rede cristalina, é possível fazer uma redução no número de constantes de força independentes e isto é o que será visto a seguir.

II.4- SIMETRIA DA REDE CRISTALINA

Quando se considera dois vetores da rede cristalina \vec{L} e $\vec{\ell}$, relacionados por uma transformação unitária "T", a saber, $\vec{L} = T\vec{\ell}$, verifica-se que ao mover-se um dado átomo de \vec{L} para $(\vec{L} + T\vec{u}_\ell)$, a variação de energia será a mesma que se o íon fosse movido de $\vec{\ell}$ para $(\vec{\ell} + \vec{u}_\ell)$, o que pode ser representado por ⁽¹⁹⁾:

$$\left[\phi_{\alpha\beta}(T\vec{\ell}) \right] = (T_{ij}) \left[\phi_{\alpha\beta}(\vec{\ell}) \right] (T_{ij})^+ \quad (\text{II.4.1})$$

onde (T_{ij}) é uma matriz que representa a transformação unitária "T" do grupo de rotações da rede cristalina.

Retomando a equação (II.2.12) e considerando a operação da transformação T sobre o vetor de onda das vibrações cristalinas (\vec{q}) , tem-se:

$$\begin{aligned} D_{\alpha\beta}(T\vec{q}) &= \frac{1}{M} \sum_{\vec{\ell}} \phi_{\alpha\beta}(\vec{\ell}) e^{-i(T\vec{q}) \cdot \vec{\ell}} \\ &= \frac{1}{M} \sum_{\vec{\ell}} \phi_{\alpha\beta}(\vec{\ell}) e^{-i\vec{q} \cdot T^+ \vec{\ell}} \\ &= \frac{1}{M} \sum_{\vec{\ell}} \phi_{\alpha\beta}(T\vec{\ell}) e^{-i\vec{q} \cdot \vec{\ell}} \quad (\text{II.4.2}) \end{aligned}$$

a última transformação acima segue do fato de $T\vec{\ell}$ ser um vetor da rede cristalina.

Das equações (II.4.1) e (II.4.2) verifica-se que:

$$[D(T\vec{q})] = (T_{ij}) [D(\vec{q})] (T_{ij})^+$$

Então, $D(T\vec{q})$ e $D(\vec{q})$ estão relacionados por uma transformação unitária, possuindo os mesmos autovalores. Isto significa que $\omega^2(\vec{q})$ tem a simetria da zona de Brillouin, como já foi mostrado anteriormente no item II.2 e ainda mostra que se pode esperar degenerescência na frequência de vibração da rede cristalina em pontos de simetria para os quais há operadores "T" tais que $T\vec{q} = \vec{q} + \vec{G}$, onde \vec{G} é um vetor da rede recíproca.

II.4.1- MODOS DE ALTA SIMETRIA NUMA REDE CÚBICA DE FACES CENTRADAS

Para se obter as constantes de força do Alumínio, consideraremos apenas as curvas de dispersão do metal ao longo de duas das direções de mais alta simetria do cristal a saber:

- 1) Direção $\Delta \equiv (0,0,q)$: os três vetores de polarização para essa direção são $(0,0,1)$, $(0,1,0)$ e $(1,0,0)$. 0

primeiro vetor indica um modo puramente longitudinal, enquanto que os dois últimos indicam um modo transversal degenerado, como será verificado no Capítulo IV, ítem IV.3.

- 2) Direção $\} \equiv (q, q, 0)$: os três vetores de polarização para esta direção são $(1, 1, 0)$, $(1, -1, 0)$ e $(0, 0, 1)$. O primeiro vetor indica um modo puramente longitudinal, enquanto que os dois últimos indicam modos transversais, em geral não degenerados.

II.5- MATRIZ DINÂMICA PARA VIBRAÇÕES EM UM MEIO CONTÍNUO COM SIMETRIA CÚBICA

As relações entre as constantes de força e as constantes elásticas do cristal que são grandezas características do metal em estudo, podem ser obtidas por meio da comparação entre a matriz dinâmica de um sólido cristalino e a matriz para vibrações em um meio contínuo, ambas consideradas na mesma simetria.

No que se segue será apresentada uma breve dedução da matriz dinâmica para vibrações em um meio contínuo.

Num meio contínuo, o tensor de forças (P_{ij}) e o tensor de deformações (E_{ij}) são simétricos e possuem nove elementos dos quais seis são independentes. De acordo com a forma geral da lei de Hooke, cada um dos nove elementos de (P_{ij}) estão linearmente relacionados com os nove elementos de (E_{ij}) . A lei estabelece explicitamente que:

$$P_{ij} = \sum_{\ell} \sum_{m} T_{ij, \ell m} E_{\ell m} \quad (II.5.1)$$

onde as constantes $T_{ij, \ell m}$ formam um tensor de quarta ordem.

Na notação habitual representam-se as deformações pelos símbolos e_{ij} que estão relacionados a E_{ij} da seguinte forma:

$$\begin{aligned} e_{ii} &= E_{ii} \\ e_{ij} &= 2E_{ij}, \quad (i \neq j) \end{aligned} \quad (II.5.2)$$

sendo $E_{ij} = E_{ji}$. Indicando as componentes de um deslocamento (representando uma deformação) por μ_1 , μ_2 e μ_3 , então os E_{ij} serão definidos pelas equações⁽¹⁰⁾

$$e_{11} = \frac{\partial \mu_1}{\partial x_1} ; e_{22} = \frac{\partial \mu_2}{\partial x_2} ; e_{33} = \frac{\partial \mu_3}{\partial x_3}$$

$$e_{12} = \frac{\partial \mu_1}{\partial x_2} + \frac{\partial \mu_2}{\partial x_1} ; e_{23} = \frac{\partial \mu_2}{\partial x_3} + \frac{\partial \mu_3}{\partial x_2} ; e_{13} = \frac{\partial \mu_1}{\partial x_3} + \frac{\partial \mu_3}{\partial x_1}$$

(II.5.3)

onde x_1 , x_2 e x_3 são as componentes cartesianas x, y e z respectivamente.

Num meio que apresenta simetria cúbica, quando os tensores P_{ij} e $e_{\ell m}$ estão linearmente relacionados de acordo com a relação tensorial (II.5.1), os coeficientes C_{rs} das componentes de deformação nas seis equações lineares, formam a seguinte matriz:

$$\begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{bmatrix}$$

(II.5.4)

Os coeficientes C_{rs} estão relacionados com os elementos do tensor $T_{ij,\ell m}$; por exemplo:

$$C_{11} = T_{11,11}$$

$$C_{12} = T_{11,12}$$

$$C_{44} = \frac{1}{2}(T_{23,23} + T_{23,32}) \quad (II.5.5)$$

A redução dos vinte e um possíveis C_{rs} para somente três coeficientes independentes é uma consequência da necessidade de que a forma tensorial (II.5.1) seja invariante quanto às operações de simetria de um cubo⁽¹¹⁾. Os coeficientes C_{11} , C_{12} e C_{44} são as constantes elásticas de cristais cúbicos na notação de Voigt⁽¹²⁾.

Substituindo as igualdades (II.5.3) nas relações lineares entre P_{ij} e e_{lm} e usando (II.5.4), obtém-se:

$$P_{ii} = (C_{11} - C_{12}) \frac{\partial \mu_i}{\partial x_i} + C_{12} \left[\sum_{k=1}^3 \frac{\partial \mu_k}{\partial x_k} \right]; \quad i=1,2,3 \quad (\text{II.5.6})$$

$$P_{ij} = C_{44} \left[\frac{\partial \mu_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \mu_j}{\partial x_i} \right]; \quad i = 1,2,3, \quad j = 2,3 \text{ e } j > i$$

Abaixo está escrita a expressão da condição de equilíbrio⁽¹⁰⁾ entre as forças atuando num volume unitário de massa ρ e as forças de superfície, representadas por P_{ij} :

$$-\rho \frac{\partial^2 \mu_i}{\partial t^2} + \left[\sum_{k=1}^3 \frac{\partial P_{ik}}{\partial x_k} \right] = 0 \quad ; \quad i = 1,2,3 \quad (\text{II.5.7})$$

Substituindo as equações (II.5.6) em (II.5.7), obtém-se as equações de onda para cristais de simetria cúbica:

$$\rho \frac{\partial^2 \mu_i}{\partial t^2} = (C_{11} - C_{12}) \frac{\partial^2 \mu_i}{\partial x_i^2} + C_{12} \left[\sum_{k=1}^3 \frac{\partial^2 \mu_k}{\partial x_i \partial x_k} \right] + C_{44} \left[\sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^3 \left[\frac{\partial^2 \mu_i}{\partial x_j^2} + \frac{\partial^2 \mu_j}{\partial x_i \partial x_j} \right] \right]; \quad i = 1, 2, 3 \quad (\text{II.5.8})$$

Para resolver estas equações, deve-se considerar a expressão para uma onda plana:

$$\mu_j = A_j \exp[i(\omega t - \vec{q} \cdot \vec{x})] \quad ; \quad j = 1, 2, 3 \quad (\text{II.5.9})$$

O resultado dessa substituição é um sistema de três equações homogêneas em A_1, A_2, A_3 :

$$\left[\begin{array}{l} [(C_{11}-C_{44})q_1^2 + C_{44}q^2 - \rho\omega^2]A_1 + (C_{12}+C_{44})q_1q_2A_2 + (C_{12}+C_{44})q_1q_3A_3 = 0 \\ [(C_{12}+C_{44})q_1q_2A_1 + [(C_{11}-C_{44})q_2^2 + C_{44}q^2 - \rho\omega^2]A_2 + (C_{12}+C_{44})q_2q_3A_3 = 0 \\ [(C_{12}+C_{44})q_1q_3A_1 + (C_{12}+C_{44})q_2q_3A_2 + [(C_{11}-C_{44})q_3^2 + C_{44}q^2 - \rho\omega^2]A_3 = 0 \end{array} \right. \quad (\text{II.5.10})$$

onde $q^2 = q_1^2 + q_2^2 + q_3^2$.

Para que não se tenha somente solução trivial no sistema (II.5.10), é necessário que o determinante dos coeficientes seja igual a zero, o qual pode ser escrito na seguinte forma:

$$\det [D(\vec{q}) - \rho\omega^2 I] = 0 \quad (\text{II.5.11})$$

onde I é a matriz identidade e $D(\vec{q})$ é a matriz dinâmica para um cristal de simetria cúbica num meio contínuo (limite para grandes comprimentos de onda), sendo representada pela equação abaixo (II.5.12).

$$D(\vec{q}) = \left[\begin{array}{ccc} (C_{11}-C_{44})q_1^2 + C_{44}q^2 & (C_{12}+C_{44})q_1q_2 & (C_{12}+C_{44})q_1q_3 \\ (C_{12}+C_{44})q_1q_2 & (C_{11}-C_{44})q_2^2 + C_{44}q^2 & (C_{12}+C_{44})q_2q_3 \\ (C_{12}+C_{44})q_1q_3 & (C_{12}+C_{44})q_2q_3 & (C_{11}-C_{44})q_3^2 + C_{44}q^2 \end{array} \right] \quad (\text{II.5.12})$$

A matriz $D(\vec{q})$ será usada posteriormente para se obter as já mencionadas relações entre as constantes elásticas e as constantes de força do alumínio.

No Capítulo IV, ítem IV.3, veremos que o conhecimento dessas relações vai possibilitar a determinação das constantes de força, no modelo Born-von Karman.

Antes de apresentar as considerações teóricas sobre o espalhamento coerente inelástico de nêutrons por um fonon que é o processo mais importante para a determinação experimental das relações de dispersão e o conseqüente estudo de dinâmica de redes abordado no presente trabalho, apresentaremos o ítem seguinte que descreve de uma maneira geral os processos de interação de nêutrons lentos com a matéria.

II.6- INTERAÇÃO DE NÊUTRONS LENTOS COM A MATÉRIA

II.6.1- INTRODUÇÃO

Nêutrons lentos interagem com a matéria de duas maneiras: a primeira é especificamente nuclear, entre o nêutron e o núcleo e a segunda é uma interação eletromagnética devida ao nêutron possuir momento de dipolo magnético. Na interação nuclear podemos ter dois tipos de fenômenos: a captura radioativa dos nêutrons pelo núcleo e o espalhamento nuclear. No presente trabalho tem-se interesse em somente o espalhamento devido à interação nuclear. A medida da probabilidade de ocorrência desse processo de interação é dada em termos da secção de choque de espalhamento.

As premissas fundamentais para o cálculo de secção de choque são as seguintes ⁽⁵⁾:

- 1) O comprimento de onda de Broglie de um nêutron lento é muito maior que as dimensões do núcleo ($\sim 10^5$ vezes maior), desse modo o espalhamento por um núcleo é considerado isotrópico e independente da energia do nêutron.

- 2) A interação entre o nêutron e o i -ésimo núcleo é representada pelo pseudopotencial de Fermi

$$V_i(\vec{r}) = \left[\frac{2\pi\hbar^2 b_i}{m} \right] \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) \quad (\text{II.6.1.1})$$

onde m é a massa do nêutron, $\delta(\vec{r} - \vec{r}_i)$ é a função delta de Dirac e b_i é a "amplitude de espalhamento" do núcleo.

- 3) O espalhamento pelo conjunto de núcleos em um sólido cristalino é obtido somando-se os espalhamentos pelos núcleos individuais, considerando as relações de fases das ondas espalhadas.
- 4) A amplitude de espalhamento b_i pode não ser a mesma para todos os núcleos do mesmo elemento: os diferentes isótopos espalham diferentemente e ainda, se o spin nuclear é diferente de zero, a amplitude de espalhamento depende da orientação relativa dos spins do nêutron e do núcleo.

Normalmente os núcleos que têm diferentes amplitudes de espalhamento distribuem-se aleatoriamente no sólido cristalino e, nesse caso é conveniente dividir a secção de choque total de espalhamento σ_t em duas partes, uma coerente (σ_{coe}) e a outra incoerente (σ_{inc}). Vamos indicar os movimentos de um núcleo no cristal por uma função de onda Ψ . Assim, a secção de choque de espalhamento pode ser escrita.

$$\sigma_t = \Psi \langle b_i, b_j \rangle \quad (\text{II.6.1.2})$$

onde $\langle \dots \rangle$ indica uma média sobre todos os pares de núcleos i, j . Indicando pelo índice "S" o termo onde $i=j$ e pelo índice "d" onde $i \neq j$, tem-se:

$$\begin{aligned} \sigma_t &= \Psi_S \langle b_i^2 \rangle + \Psi_d \langle b_i \rangle^2 \\ &= \Psi_S (\langle b_i^2 \rangle - \langle b_i \rangle^2) + (\Psi_S + \Psi_d) \langle b_i \rangle^2 \\ &= \sigma_{\text{inc}} + \sigma_{\text{coe}} \end{aligned} \quad (\text{II.6.1.3})$$

Nota-se que a secção de choque coerente depende do quadrado da média da amplitude de espalhamento e contém componentes de interferência da função de onda. Por outro lado, a secção de choque incoerente depende somente do espalhamento por um núcleo individual (não contém efeitos de interferência), e é zero se todos os b_i forem iguais.

A importância dessa divisão em σ_t está no fato de Ψ conter duas funções delta:

$$\delta \left[E_0 - E_1 + \sum_{\ell} \hbar \omega_j(\vec{q}_{\ell}) \right] \cdot \delta(\vec{k}_0 - \vec{k}_1 - \vec{Q}) \quad (\text{II.6.1.4})$$

onde $\vec{Q} = \vec{G} + \sum_{\ell} \vec{q}_{\ell}$.

A soma sobre ℓ indica que o processo de espalhamento pode envolver a criação ou aniquilação de ℓ fonons de vetores de onda \vec{q}_{ℓ} ; \vec{G} é um vetor da rede recíproca do sólido cristalino e \vec{Q} é o chamado vetor transferência de quantidade de movimento; $E_0(\vec{k}_0)$ e $E_1(\vec{k}_1)$ são as energias (vetores de onda) dos nêutrons incidente e espalhado na interação, respectivamente; $\omega = \omega_j(\vec{q})$ é a relação de dispersão de fonons.

A primeira função delta em (II.6.1.4) representa a conservação da energia e aparece em ambas as funções de onda Ψ_S e Ψ_D ; a segunda função representa a conservação da quantidade de movimento e aparece somente em Ψ_D . Portanto, a secção de choque de espalhamento incoerente não contém nenhuma informação sobre as posições relativas dos diferentes núcleos no cristal, podendo somente fornecer informações sobre a distribuição de energia dos fonons. Medidas de espalhamento coerente podem ser usadas para se obter informações sobre a estrutura do cristal e sobre a relação de dispersão de fonons $\omega = \omega_j(\vec{q})$.

Em (II.6.1.4), se $\ell = 0$, tem-se espalhamento coerente elástico ou de Bragg, no qual $E_0 = E_1$ desse modo o espalhamento corresponderá somente aos pontos da rede recíproca, cuja construção pode ser vista no Apêndice I. Se $\ell = 1$ tem-se espalhamento coerente inelástico de um fonon que é o processo de maior interesse deste trabalho.

II.6.2- ESPALHAMENTO COERENTE INELÁSTICO DE UM FONON

Seja um sistema no qual o feixe incidente de nêutrons é representado por uma onda plana $\Psi_0 = \exp(i\vec{k}_0 \cdot \vec{r})$ e a amostra por um conjunto de $3nN$ osciladores harmônicos, onde N é o número de células unitárias contendo cada uma n átomos. O número total de graus de liberdade da amostra é $3nN$ e o estado inicial da amostra é representado por $n_0(\vec{q})$. O estado final do sistema é um feixe de nêutrons espalhado, representado por uma onda plana $\Psi_1 = \exp(i\vec{k}_1 \cdot \vec{r})$ e um conjunto de osciladores $n_1(\vec{q})$. A interação total é uma superposição das interações individuais dadas cada uma delas por (II.6.1.1).

$$V = \frac{2\pi\hbar^2}{m} \sum_{i=1}^N \sum_{S=1}^n b_{iS} \delta(\vec{r} - \vec{r}_{iS}) \quad (\text{II.6.2.1})$$

onde \vec{r}_{iS} é a posição do S -ésimo átomo da i -ésima célula unitária e b_{iS} a amplitude de espalhamento do átomo.

A secção de choque de espalhamento é proporcional ao quadrado do módulo do elemento de matriz que representa a probabilidade de transição entre os estados inicial e final:

$$[\langle \Psi_1, n_1 | V | \Psi_0, n_0 \rangle]^2 \quad (\text{II.6.2.2})$$

Essa expressão é proporcional à secção de choque de espalhamento duplamente diferencial $d^2\sigma/d\Omega dE_1$, pois ela se refere aos nêutrons espalhados num ângulo sólido compreendido entre Ω e $\Omega + d\Omega$ e energias entre E_1 e $E_1 + dE_1$. Então, pode-se escrever a expressão da secção de choque para o espalhamento de nêutrons que mudam de um estado Ψ_0 para um estado Ψ_1 , enquanto a amostra sofre transição do estado $n_0(\vec{q})$ para o estado $n_1(\vec{q})$, do seguinte modo (5) :

$$\left[\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE_1} \right]_{n_0 \rightarrow n_1} = \left[\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right]^2 \frac{k_1}{k_0} | \langle \Psi_1, n_1 | V | \Psi_0, n_0 \rangle |^2 \quad (\text{II.6.2.3})$$

onde V é o potencial de interação e k_1/k_0 significa que a secção de choque é calculada por unidade de fluxo de nêutrons incidentes.

A forma mais geral da secção de choque é obtida a partir da equação (II.6.2.3) efetuando-se a soma sobre todos os possíveis estados finais $n_1(\vec{q})$ e tomando-se a média do resultado sobre todos os estados iniciais onde cada um deles tem probabilidade P_{n_0} :

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE_1} = \left[\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right]^2 \frac{k_1}{k_0} \sum_{n_0} P_{n_0} \sum_{n_1} |\langle \psi_{1,n_1} | V | \psi_{0,n_0} \rangle|^2 \quad (\text{II.6.2.4})$$

Pode-se calcular a parte do elemento de matriz (II.6.2.2) que envolve as coordenadas do nêutron:

$$\begin{aligned} \langle \psi_1 | V | \psi_0 \rangle &= \frac{2\pi\hbar^2}{m} \sum_{i,S} b_{iS} \int d^3r \exp(-i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}) \delta(\vec{r} - \vec{r}_{iS}) \exp(i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}) \\ &= \frac{2\pi\hbar^2}{m} \sum_{i,S} b_{iS} \exp[i(\vec{k}_0 - \vec{k}_1) \cdot \vec{r}_{iS}] \\ &= \frac{2\pi\hbar^2}{m} \sum_{i,S} b_{iS} \exp(i\vec{Q} \cdot \vec{r}_{iS}) \end{aligned} \quad (\text{II.6.2.5})$$

Substituindo (II.6.2.5) em (II.6.2.4), obtém-se;

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE_1} = \frac{k_1}{k_0} \sum_{n_0} P_{n_0} \sum_{n_1} |\langle n_1 | \sum_{i,S} b_{iS} \exp(i\vec{Q} \cdot \vec{r}_{iS}) | n_0 \rangle|^2 \quad (\text{II.6.2.6})$$

Fazendo uso da definição (II.6.1.3) pode-se dividir a secção de choque nas partes coerente e incoerente. A secção de choque coerente, que é a de interesse no presente trabalho, será então dada por:

$$\frac{d^2 \sigma_{\text{coe}}}{d\Omega dE_1} = \frac{k_1}{k_0} \sum_{n_0} P_{n_0} \sum_{n_1} |\langle n_1 | \sum_{i,S} b_{iS}^{\text{coe}} \exp(i\vec{Q} \cdot \vec{r}_{iS}) | n_0 \rangle|^2 \quad (\text{II.6.2.7})$$

A expressão para a secção de choque de espalhamento coerente para processos envolvendo um fonon de frequência $\omega_j(\vec{q})$ é obtida a partir do cálculo⁽⁵⁾ do elemento de matriz presente na equação (II.6.2.7).

$$\left| \frac{d^2 \sigma_{\text{coe}}}{d\Omega dE_1} \right|_{1 \text{ fonon}} = \frac{8\pi^3 \hbar}{v_0} \frac{k_1}{k_0} \left[n_j(\vec{q}) + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right] |G_j(\vec{q}, \vec{Q})|^2 D_1 D_2 \quad (\text{II.6.2.8})$$

onde

$$n_j(\vec{q}) = \frac{1}{\exp[\hbar\omega_j(\vec{q})/k_B T] - 1} \quad \text{é o fator de população.} \quad (\text{II.6.2.9})$$

$$D_1 = \delta[E_0 - E_1 \mp \hbar\omega_j(\vec{q})] \quad (\text{II.6.2.10})$$

$$D_2 = \delta[\vec{k}_0 - \vec{k}_1 - \vec{q} - \vec{Q}] \quad (\text{II.6.2.11})$$

$$G_j(\vec{q}) = \sum_S \frac{b_S^{\text{coe}} e^{-\omega_S}}{[m_S \omega_j(\vec{q})]^{1/2}} [\vec{Q} \cdot \hat{e}_j(\vec{q})] e^{i\vec{Q} \cdot \vec{r}_S} \quad \text{é o fator}$$

de estrutura. (II.6.2.12)

sendo ω_S o fator de Debye-Waller, \vec{r}_S a posição do S-ésimo átomo dentro da célula unitária, m_S a massa do átomo S, $\hat{e}_j(\vec{q})$ o vetor de polarização do fonon que se propaga com vetor de onda \vec{q} e v_0 o volume da célula unitária do cristal. Nas equações (II.6.2.8) e (II.6.2.10) o sinal superior refere-se à criação e o sinal inferior à aniquilação de um fonon, respectivamente.

Para baixas temperaturas e temperatura ambiente o processo de criação de fonons apresenta maior secção de choque que o de aniquilação e as equações básicas para o planejamento experimental de uma medida de relação de dispersão para esses casos são dadas por:

$$E_0 = E_1 + \hbar\omega_j(\vec{q}) \quad (\text{II.6.2.13})$$

$$\vec{k}_0 = \vec{k}_1 + \vec{q} + \vec{G} \quad (\text{II.6.2.14})$$

A interpretação física da função delta (II.6.2.11) pode ser obtida considerando-se dois casos: 1) Na figura (II.6.1), \vec{Q} está dentro da primeira zona de Brillouin, ou seja, procura-se o nêutron difratado na região de estados em que \vec{k}_1 não difere de \vec{k}_0 em mais de meio vetor de onda da rede recíproca (\vec{G}). Nesse caso, todos os vetores de onda \vec{q} estão dentro da primeira zona de Brillouin de modo que o único termo que fica em (II.6.2.11) é $\vec{q} = \vec{Q}$, ou $\vec{q} = \vec{k}_1 - \vec{k}_0$. 2) Se \vec{Q} está fora da primeira zona de Brillouin, figura (II.6.2), há um valor de q tal que $\vec{q} = \vec{k}_1 - \vec{k}_0 - \vec{G}$.

Como a primeira zona de Brillouin é uma célula unitária da rede recíproca, pode-se repetí-la de modo a cobrir exatamente todo o espaço dos vetores de onda. Conseqüentemente, qualquer valor de \vec{Q} pode ser obtido univocamente com um vetor \vec{G} e um dado valor de \vec{q} (um vetor que se restringe à primeira zona de Brillouin). Pode-se então dizer que \vec{q} é o valor de \vec{Q} "reduzido" à primeira zona de Brillouin.

Haverá espalhamento em qualquer direção que se deseje, mas a intensidade dependerá da amplitude das vibrações cristalinhas que tenham precisamente o vetor de onda necessário para satisfazer corretamente as condições exigidas.

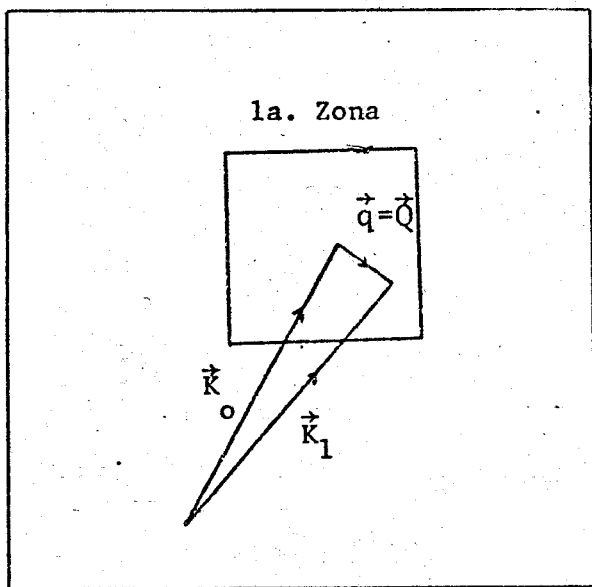
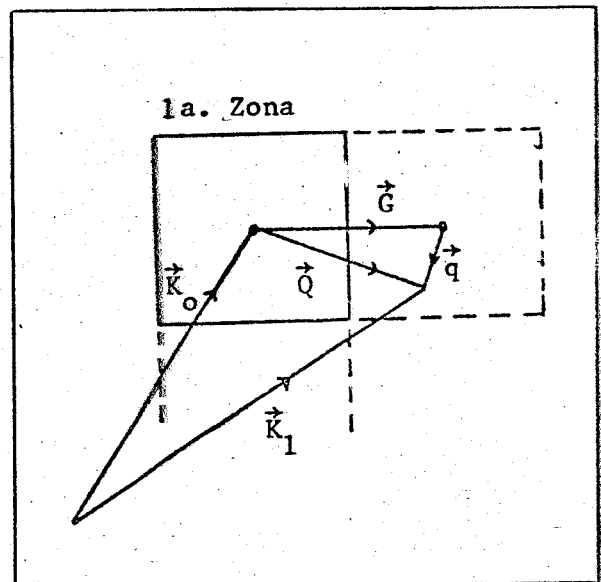


Figura (II.6.1)



(Figura (II.6.2))

III. ARRANJO EXPERIMENTAL E METODO DE MEDIDA

III.1- ARRANJO EXPERIMENTAL

Para a determinação experimental da curva de relação de dispersão foi utilizado um espectrômetro de três eixos para nêutrons, porque esse instrumento permite a análise dos nêutrons espalhados em ângulo e energia, o que possibilita a determinação das trocas de energia e quantidade de movimento entre os nêutrons e a amostra (sistema espalhador).

O espectrômetro de três eixos do Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares de São Paulo (IPEN) foi inteiramente projetado e construído no IPEN e está instalado no canal de irradiação número dez do reator de pesquisa (IEA-R1), tipo piscina, do IPEN, que opera a uma potência de 2 Mw, com fluxo próximo de 10^{13} nêutrons térmicos/(cm².seg) na posição do caroço.

Esses nêutrons, que possuem um espectro de energias aproximadamente maxweliano, são extraídos por um sistema de colimação instalado no canal de irradiação do reator e atingem um cristal monocromador X₁ colocado fixo no centro da blindagem principal do espectrômetro (figura III.1.1). O cristal X₁ reflete os nêutrons (espalhamento de Bragg) de um particular comprimento de onda e energia por um ângulo⁽⁷⁾ $2\theta_m (= 40,22^\circ)$, os quais após serem transmitidos pelo colimador C₂, incidem na amostra S. Um detector monitor (M₁) de baixa sensibilidade monitora o fluxo de nêutrons incidentes na amostra e a sua taxa de contagem é normalmente usada para controlar o sinal para os tempos de contagem durante o experimento.

A amostra está colocada em uma mesa giratória, cuja orientação é indicada pelo ângulo ψ (figura III.2.1). Após o espalhamento inelástico pela amostra, os nêutrons espalhados num ângulo ϕ passam pelo colimador C₃ e são analisados em energia pelo cristal analisador X₂ em função do ângulo $2\theta_A$, atingindo finalmente o detector de ³He.

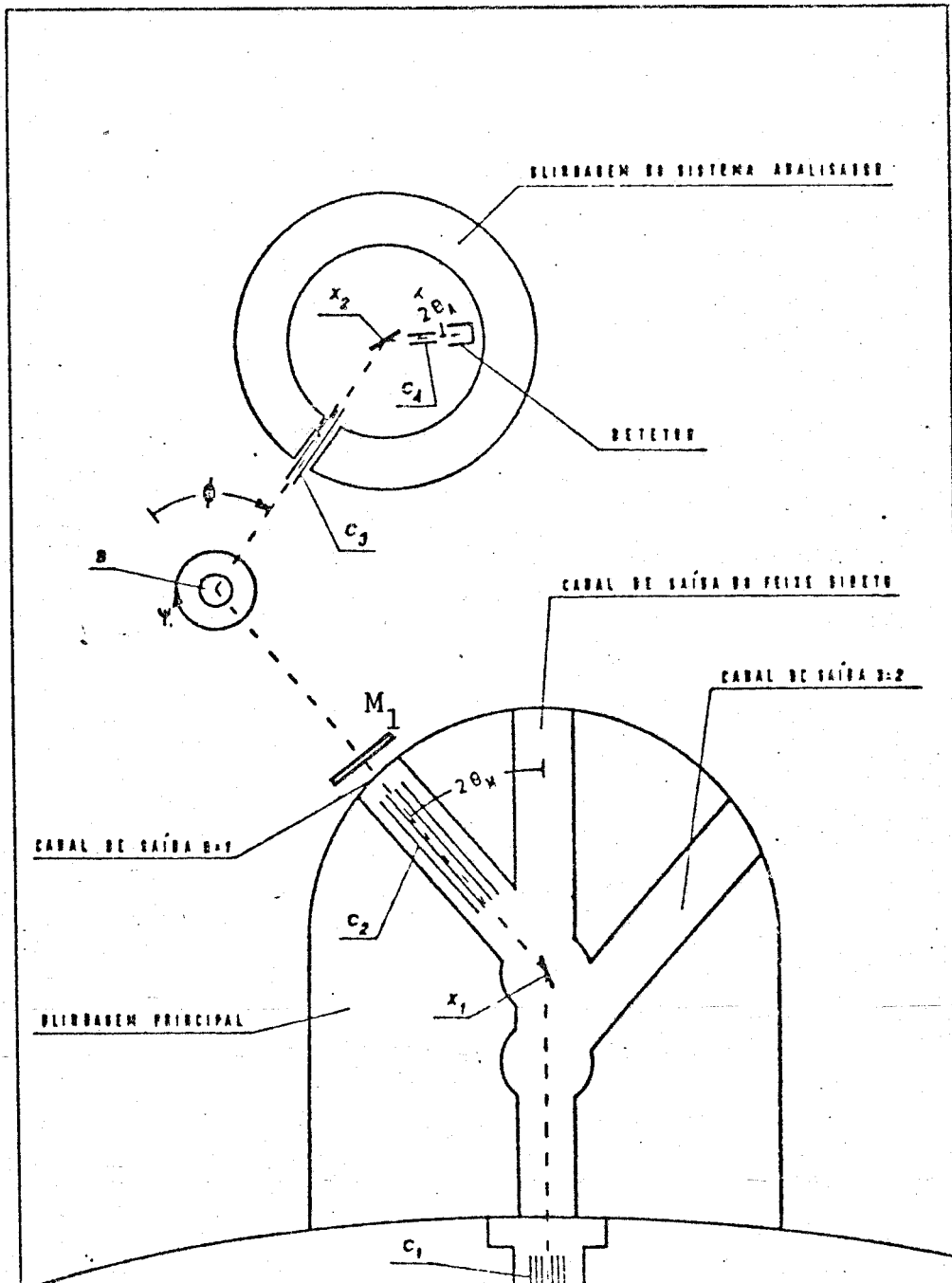


Figura (III.1.1)- Espectrômetro de Três Eixos do IPEN.

III.2- MÉTODO DE MEDIDA

O espectrômetro de três eixos do IPEN opera com um plano cristalino da amostra fixo horizontalmente em relação ao plano do espectrômetro, o qual por sua vez é definido pelos vetores de onda dos nêutrons incidentes e espalhados. Vamos definir um conjunto ortogonal de eixos xyz com x e y definindo o plano do espectrômetro. Sendo $\vec{k}_0 = (k_{0x}, k_{0y}, 0)$ e $\vec{k}_1 = (k_{1x}, k_{1y}, 0)$ os vetores de onda dos nêutrons incidentes e espalhados respectivamente, as equações de conservação (II.6.2.13) e (II.6.2.14) podem ser escritas na forma:

$$\frac{\hbar^2}{2m}(k_{0x}^2 + k_{0y}^2 - k_{1x}^2 - k_{1y}^2) = \pm \hbar \omega_j(\vec{q}) \quad (\text{III.2.1})$$

$$k_{0x} - k_{1x} = Q_x = G_x + q_x \quad (\text{III.2.2})$$

$$k_{0y} - k_{1y} = Q_y = G_y + q_y \quad (\text{III.2.3})$$

As condições experimentais podem ser melhor visualizadas com o auxílio de um diagrama da rede recíproca (figura III.2.1), mostrando a relação entre os vetores de onda do nêutron e a orientação da amostra cristalina (os pequenos círculos são pontos da rede recíproca no plano xy).

Optou-se por seguir a mesma convenção de sinais adotada pelos pesquisadores de Chalk River, Canadá, onde se desenvolve intensa atividade experimental utilizando espectrômetro de três eixos. Pela convenção, xy é o plano horizontal do espectrômetro, + ψ indica uma rotação horária de y com relação a \vec{k}_0 e + ϕ indica uma deflexão horária de \vec{k}_1 com respeito a \vec{k}_0 . Com essa convenção, as equações III.2.2 e III.2.3 podem ser expressas em termos dos ângulos do espectrômetro:

$$Q_x = -k_0 \sin \psi - k_1 \sin(\phi - \psi) \quad (\text{III.2.4})$$

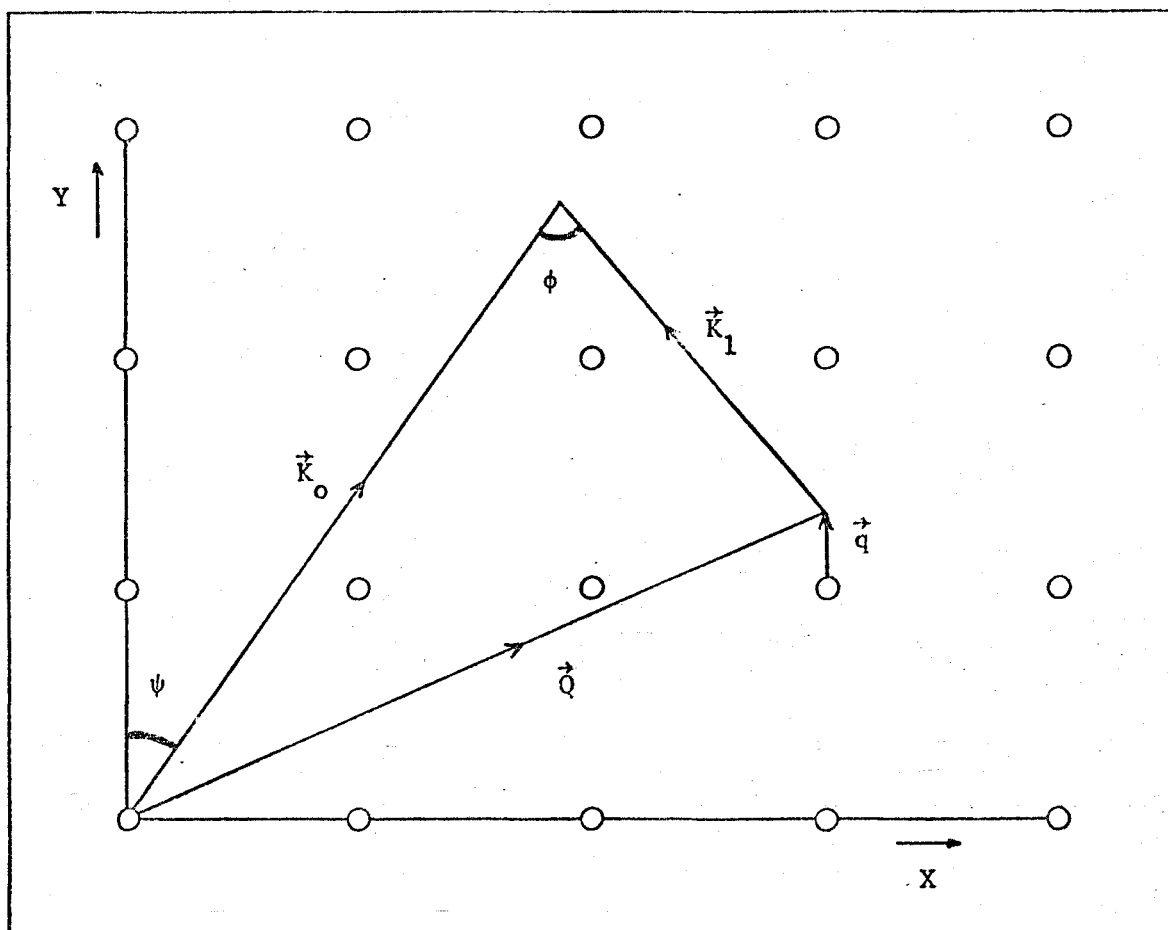


Figura (III.2.1)- Construção Vetorial que Mostra a Situação Experimental para a Propagação de um Fonon de Vetor de Onda \vec{q} .

$$Q_y = k_0 \cos \psi - k_1 \cos(\phi - \psi) \quad (\text{III.2.5})$$

onde

$$k_0 = |\vec{k}_0| \text{ e } k_1 = |\vec{k}_1|$$

Para especificar qualquer ponto experimental correspondente a uma posição da rede recíproca, é necessária uma condição adicional, uma vez que tem-se três equações (III.2.1), (III.2.4) e (III.2.5), e quatro variáveis, k_0 , k_1 , ϕ e ψ . No espectrômetro de três eixos do IPEN escolheu-se fixar k_0 .

Obtém-se as expressões para ϕ , ψ e k_1 do seguinte modo. Da figura (III.2.1), $Q^2 = k_0^2 + k_1^2 - 2k_0k_1 \cos \phi$ com $Q^2 = Q_x^2 + Q_y^2$, então,

$$\cos \phi = \frac{k_0^2 + k_1^2 - Q_x^2 - Q_y^2}{2k_0k_1} \quad (\text{III.2.6})$$

Da equação (III.2.4):

$$Q_x = -k_0 \sin \psi - k_1 (\sin \phi \cos \psi - \cos \phi \sin \psi)$$

ou

$$\cos \psi = \frac{k_1 \cos \phi \sin \psi - k_0 \sin \psi - Q_x}{k_1 \sin \phi} \quad (\text{III.2.7})$$

e de (III.2.5)

$$Q_y = k_0 \cos \psi - k_1 (\cos \phi \cos \psi + \sin \phi \sin \psi)$$

ou

$$\cos \psi = \frac{Q_y + k_1 \sin \phi \sin \psi}{k_0 - k_1 \cos \phi} \quad (\text{III.2.8})$$

Igualando as expressões (III.2.7) e (III.2.8), fica-se com:

$$(k_1 \cos \phi \sin \psi - k_0 \sin \psi - Q_x) (k_0 - k_1 \cos \phi) = (Q_y + k_1 \sin \phi \sin \psi) k_1 \sin \phi$$

de onde se obtém:

$$\sin \psi = \frac{Q_x (k_1 \cos \phi - k_0) - Q_y k_1 \sin \phi}{k_0^2 + k_1^2 - 2k_0k_1 \cos \phi} \quad (\text{III.2.9})$$

Para se obter o valor do módulo do vetor de onda dos nêutrons incidentes, é suficiente usar a expressão para o espalhamento de Bragg

$$\lambda = 2d_{hkl} \text{sen}\theta \quad (\text{III.2.10})$$

onde d_{hkl} é a distância interplanar dos planos de índices (hkl) do cristal monocromador e $\theta = 20,11^\circ$ é a metade do ângulo de espalhamento ⁽⁷⁾. Lembrando que $k=2\pi/\lambda$, o módulo do vetor de onda k_0 pode ser colocado em função da frequência ω do fonon pela condição de conservação da energia (equação(II.6.2.13)):

$$E_0 - E_1 = \hbar\omega \quad (\text{III.2.11})$$

mas para o nêutron

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (\text{III.2.12})$$

então,

$$\frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} - \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} = \hbar\omega$$

ou

$$k_1 = \left[k_0^2 - \frac{2m\omega}{\hbar} \right]^{1/2} \quad (\text{III.2.13})$$

O ângulo $2\theta_A$ do sistema analisador é obtido com o auxílio da lei de Bragg (equação (III.2.10)), onde λ vai ser dado por $\lambda = 2\pi/k_1$ e d_{hkl} é a distância interplanar da família de planos (hkl) do cristal analisador, que no presente trabalho é a família de planos (002) do grafite pirolítico. De onde se escreve:

$$2\theta_A = 2 \text{arc sen} \left(\frac{\pi}{d_{002} k_1} \right) \quad (\text{III.2.14})$$

Dessa forma, as equações (III.2.6), (III.2.8), (III.2.9) e (III.2.14), permitem a determinação única dos ângulos ϕ , ψ e $2\theta_A$ do espectrômetro em função do módulo do vetor de onda do nêutron espalhado, pois Q_x e Q_y são pré selecionados e k_0 é conhecido por construção do espectrômetro.

Para a determinação de k_1 , é necessário o conhecimento prévio da ordem de grandeza da frequência do fonon (ω). Se isso não for possível, mede-se um grupo de nêutrons pela variação da frequência ω ponto a ponto, em intervalos iguais para um determinado \vec{Q} (ou \vec{q}) fixo, até que se obtenha o pico na medida da intensidade de nêutrons espalhados pela amostra. A frequência correspondente ao máximo do pico será um ponto da relação de dispersão $\omega = \omega_j(\vec{q})$ para o vetor \vec{q} em questão e o modo de vibração j .

Portanto, o espalhamento coerente de um fonon pode ser usado para determinar a relação de dispersão para uma rede, além de não ser necessária a determinação da intensidade dos nêutrons espalhados. Para um dado vetor \vec{Q} fixo, é suficiente determinar a posição do máximo espalhamento coerente de um fonon, na escala de energia.

O método descrito acima denomina-se "método do \vec{Q} - constante".

Este é o mais usado e importante método para operar um espectrômetro de cristal de três eixos, pois é o único que garante a condição de um resultado experimental num valor de \vec{Q} pré selecionado, o que é extremamente conveniente uma vez que na maioria dos estudos da dinâmica de redes necessita-se efetuar análises e cálculos teóricos em termos de valores particulares de \vec{Q} (e portanto \vec{q}).

Outro ponto favorável ao método do \vec{Q} constante é que há uma correspondência direta entre a intensidade medida e o fator de estrutura contido na expressão da secção de choque coerente (equação (II.6.2.12)), o que facilita a realização da experiência porque através de uma análise do fator de estrutura pode-se escolher uma zona da rede recíproca conjugada com a escolha do modo de vibração, transversal ou longitudinal do fonon que deverá ser predominantemente excitado (ou desexcitado) nessa zona. Essa predominância por sua vez dependerá do vetor de onda \vec{q} e dos vetores de polarização \hat{e}_T e \hat{e}_L (o produto escalar de um vetor por esses vetores indica as componentes transversal e longitudinal do tal vetor em relação à direção de propagação do fonon).

Na maioria dos casos o vetor \vec{Q} pode ser escolhido de modo a ser aproximadamente paralelo a um dos vetores de polariza

ção e portanto praticamente perpendicular ao outro. Por exemplo, quando o vetor de polarização \hat{e}_L do modo longitudinal é perpendicular a \vec{Q} , o vetor \hat{e}_T será paralelo a \vec{Q} ; nesse caso a secção de choque será zero para o modo longitudinal e máxima para o modo transversal, por causa do produto escalar $\vec{Q} \cdot \hat{e}$ existente na equação (II.6.2.12) e somente este último modo poderá ser excitado (ou desexcitado).

III.3- ORIENTAÇÃO DA AMOSTRA

No presente trabalho utilizamos para os experimentos os planos (100) e (1 $\bar{1}$ 0) de uma amostra de alumínio na forma de um monocristal esférico com 6,4cm de diâmetro.

A fim de se utilizar para as medidas da relação de dispersão as expressões simples para o posicionamento do espectrômetro, deduzidas no item III.2 desse capítulo escolhe-se planos particulares do cristal paralelos à base do espectrômetro. Os planos são particulares porque devem possuir variação independente em somente duas das três coordenadas x, y e z, sendo a terceira mantida constante ou então igual a uma das outras.

Em seguida será apresentada uma breve discussão apenas sobre a orientação da amostra de alumínio segundo a direção (100), pois para a direção (1 $\bar{1}$ 0) o procedimento é análogo.

A figura A.I.3 mostra o corte do plano (100) da rede recíproca de uma rede real cúbica de faces centradas, onde os pontos indicados por (hkl) correspondem aos respectivos planos de átomos que possuem reflexão permitida na rede cúbica de faces centradas (Apêndice I).

Para medir um pico de fonon numa dada posição da rede recíproca da amostra deve-se orientar o cristal em relação ao feixe incidente. Para tanto utilizam-se as expressões já calculadas para o posicionamento angular do espectrômetro adaptadas ao caso particular do espalhamento de Bragg por planos do cristal. No caso do espalhamento coerente elástico (Bragg) de nêutrons por um cristal, as equações de conservação (II.6.2.13) e (II.6.2.14) podem ser reescritas como

$$\vec{Q} = \vec{k}_0 - \vec{k}_1 = \vec{G} \quad (\text{III.3.1})$$

$$E_0 = E_1 \text{ ou } k_0 = k_1 \quad (\text{III.3.2})$$

respectivamente. Nestas condições as expressões para ϕ (equação III.2.6) e ψ (equações III.2.8 e III.2.9) tornam-se

$$\cos\phi = \frac{2k_0^2 - Q_x^2 - Q_y^2}{2k_0^2} \quad (\text{III.3.3})$$

$$\cos\psi = \frac{-Q_x \sin\phi + Q_y (1 - \cos\phi)}{2k_0 (1 - \cos\phi)} \quad (\text{III.3.4})$$

$$\sin\psi = \frac{-Q_x (1 - \cos\phi) - Q_y \sin\phi}{2k_0 (1 - \cos\phi)} \quad (\text{III.3.5})$$

Por meio da equação (III.2.14) pode-se calcular o valor de $2\theta_A$, uma vez que para cada cristal monocromador utilizado, o valor de k_0 é bem conhecido.

A partir destas equações pode-se posicionar o espectrômetro para a obtenção de um feixe de nêutrons, que sofreram espalhamento coerente elástico no plano (hkl).

Uma vez identificada a reflexão de um dos planos (hkl), ajusta-se a posição zero na mesa do espectrômetro de modo a tornar possível a leitura dos ângulos ϕ e ψ relativamente à posição dos outros planos.

IV. RESULTADOS EXPERIMENTAIS E ANÁLISE DOS DADOS

IV.1- RESULTADOS EXPERIMENTAIS

A curva de relação de dispersão, $\omega = \omega(\vec{q})$, do alumínio foi medida à temperatura ambiente em duas das direções de mais alta simetria da rede FCC: a direção $\Delta \equiv (00\xi)$ e a direção $\Gamma \equiv (\xi\xi0)$. De acordo com essa notação, a posição de um ponto no plano do espaço recíproco é definida em termos de uma quantidade denominada "módulo do vetor de onda reduzido", dado pela relação $\xi = |\vec{q}|/q_{\max}$, onde q_{\max} representa o máximo valor do vetor de onda dentro da primeira zona de Brillouin numa dada direção de simetria do cristal.

Como exemplo, consideraremos o procedimento experimental para se obter a frequência de um fonon transversal acústico de vetor de onda reduzido $\xi = 0,3$, que se propaga na direção (00ξ) .

Como já foi discutido anteriormente no Capítulo III, ítem (II.2), o método utilizado para medir a frequência do fonon é o "método do \vec{Q} constante", e a construção vetorial é mostrada na figura (IV.1.1). Essa figura mostra o corte do plano $(1\bar{1}0)$ da rede recíproca da rede real FCC (Apêndice I) assim como os traços que delimitam o contorno das primeiras zonas de Brillouin. A partir da construção vetorial na figura, verifica-se que o vetor de transferência de quantidade de movimento \vec{Q} foi previamente escolhido de tal forma que o vetor \vec{q} represente um fonon na direção (00ξ) e que o modo transversal seja preferencialmente excitado.

O monocromador utilizado na medida desse grupo de nêutrons foi um cristal de cobre, cujo plano da face é paralelo à família de planos (111) . Essa escolha foi feita para se obter condições de boa focalização do espectrômetro para medida de fonon transversal na direção (00ξ) , conforme pode ser visto no Apêndice II. O diagrama de focalização correspondente à construção da figura (IV.1.1) é mostrado na figura (IV.1.2).

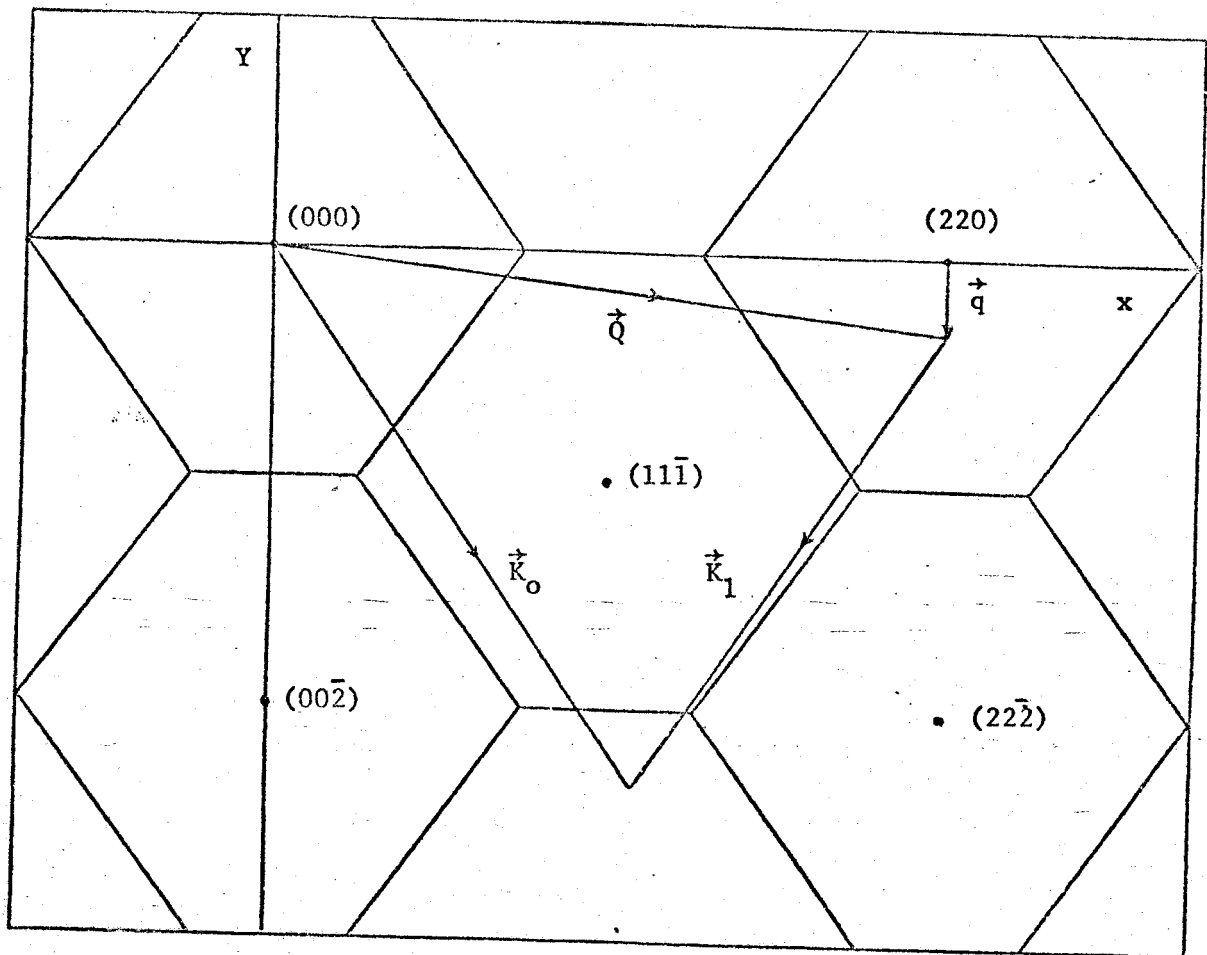


Figura (IV.1.1)- Fonon $(00\xi)T$, $\xi = 0,3$.

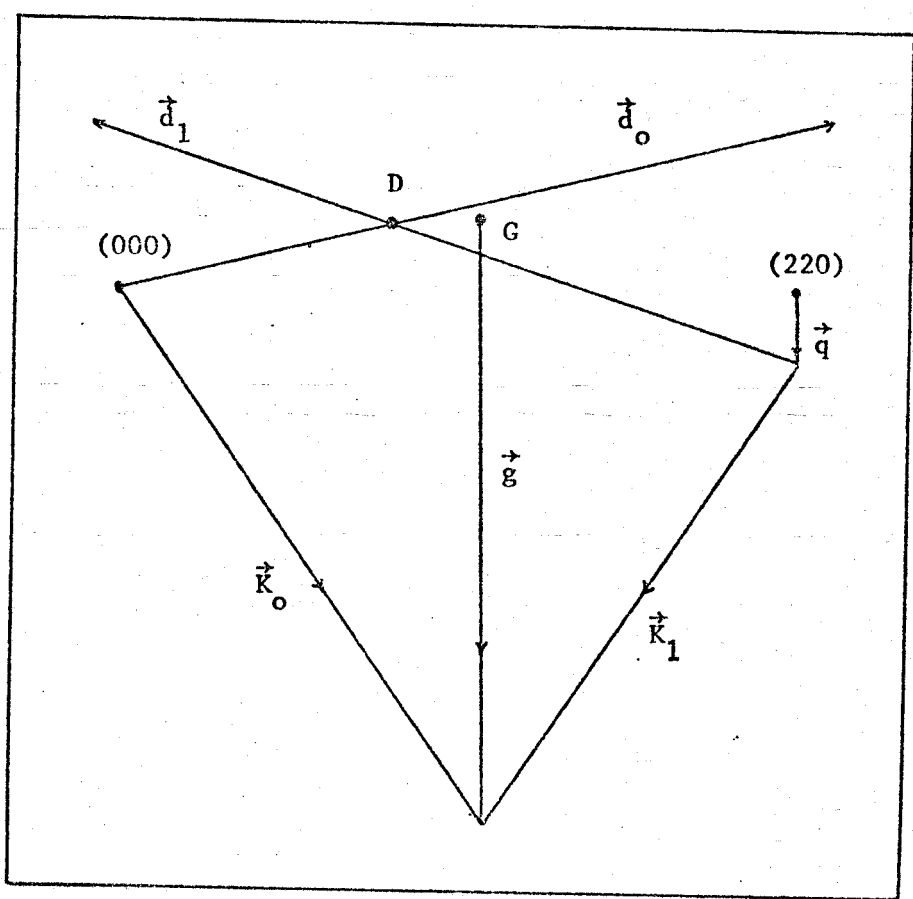


Figura (IV.1.2)- Diagrama de Focalização.

Para o caso que consideramos como exemplo $((00\xi)T$ com $\xi=0,3$) já existe na literatura ⁽²⁰⁾ o valor de $\omega=(15,6\pm 0,3)10^{12}S^{-1}$ obtido experimentalmente para a frequência desse fonon. A fim de ilustrar os procedimentos de medida iremos repetir o experimento escolhendo um intervalo de medida conveniente, centrado em torno da frequência dada na literatura, composto por 21 subintervalos. Especificamente para a frequência já mencionada, o intervalo escolhido foi de $9,43.10^{12}S^{-1}$ a $22,0.10^{12}S^{-1}$ com incrementos sucessivos de $0,63.10^{12}S^{-1}$. Para cada um desses valores de frequência, foi calculado o módulo do vetor de onda k_1 do nêutron espalhado a partir da equação (III.2.13) e também, a partir das equações (III.2.6), (III.2.8), (III.2.9) e (III.2.14), os ângulos ϕ , ψ e $2\theta_A$ de posicionamento do espectrômetro.

Para se determinar a frequência de vibração deste fonon, o espectrômetro foi posicionado e efetuou-se a medida da intensidade do feixe espalhado, sempre para um valor pré-estabelecido de contagens do monitor, para cada um dos 21 valores de frequência já citados. A partir dos resultados dessas medidas construiu-se um gráfico de frequência versus contagens como mostrado na figura (IV.1.3). A centróide do pico ($15,3.10^{12}S^{-1}$) é o valor da frequência ω do fonon transversal para o particular valor de ξ igual a 0,3. Este valor obtido experimentalmente é um ponto (ω, \vec{q}) do ramo transversal da relação de dispersão na direção $\Delta \equiv (00\xi)$.

Adotando procedimento análogo medimos vários pontos da relação de dispersão para o alumínio nas direções de alta simetria (00ξ) e $(\xi\xi0)$. Os pontos obtidos experimentalmente no presente trabalho estão representados por "■" na figura (IV.1.4).

IV.2- ANÁLISE DOS RESULTADOS EXPERIMENTAIS

Nos itens anteriores mostramos que estamos em condições de medir picos de fonons com alta precisão e aptos a efetuar medidas inéditas de relações de dispersão. Porém voltamos a salientar que o objetivo do presente trabalho não é somente o de demonstrar pleno domínio sobre as equações e técnicas experimentais que envolvem o espalhamento coerente inelástico de nêutrons por uma rede cristalina, mas principalmente desenvolver um tra

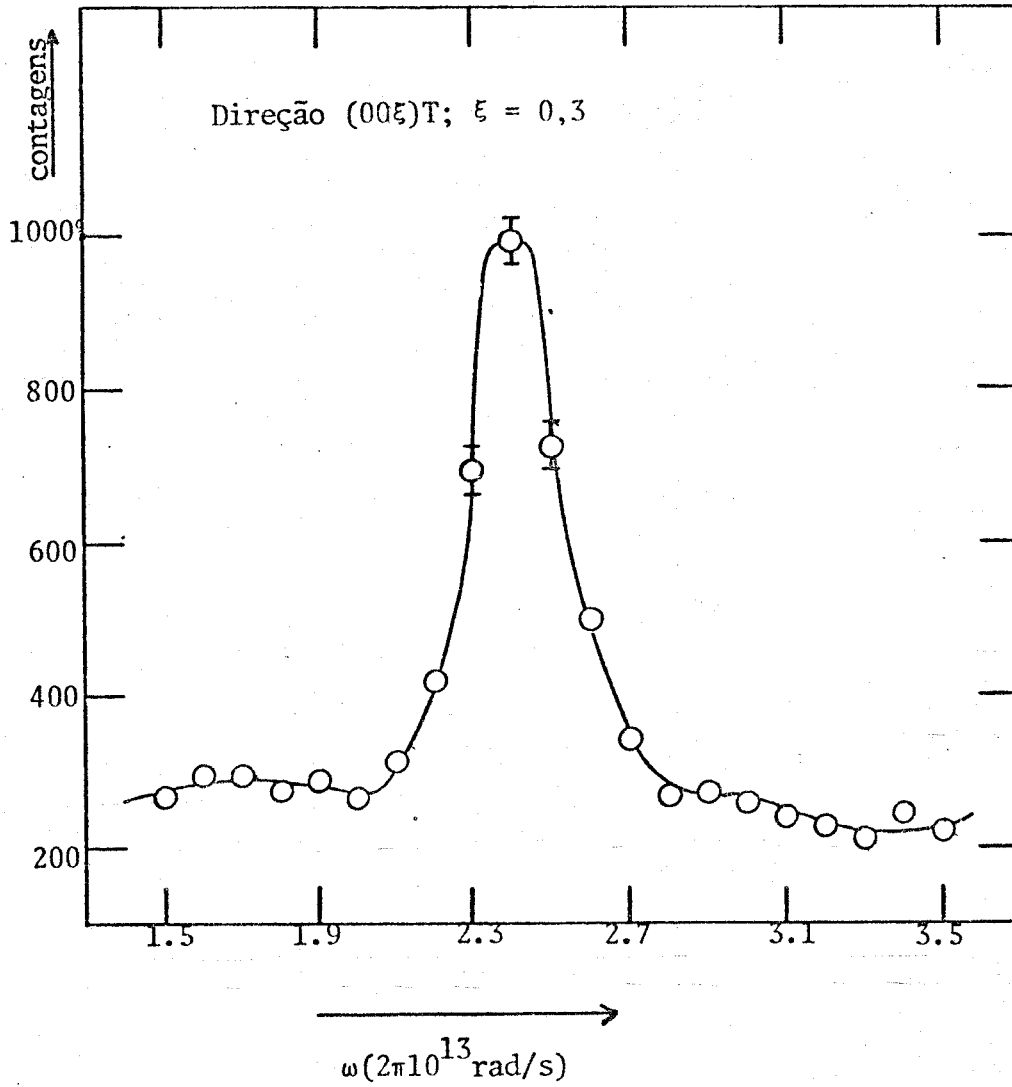


Figura (IV.1.3)- Pico de Fonon

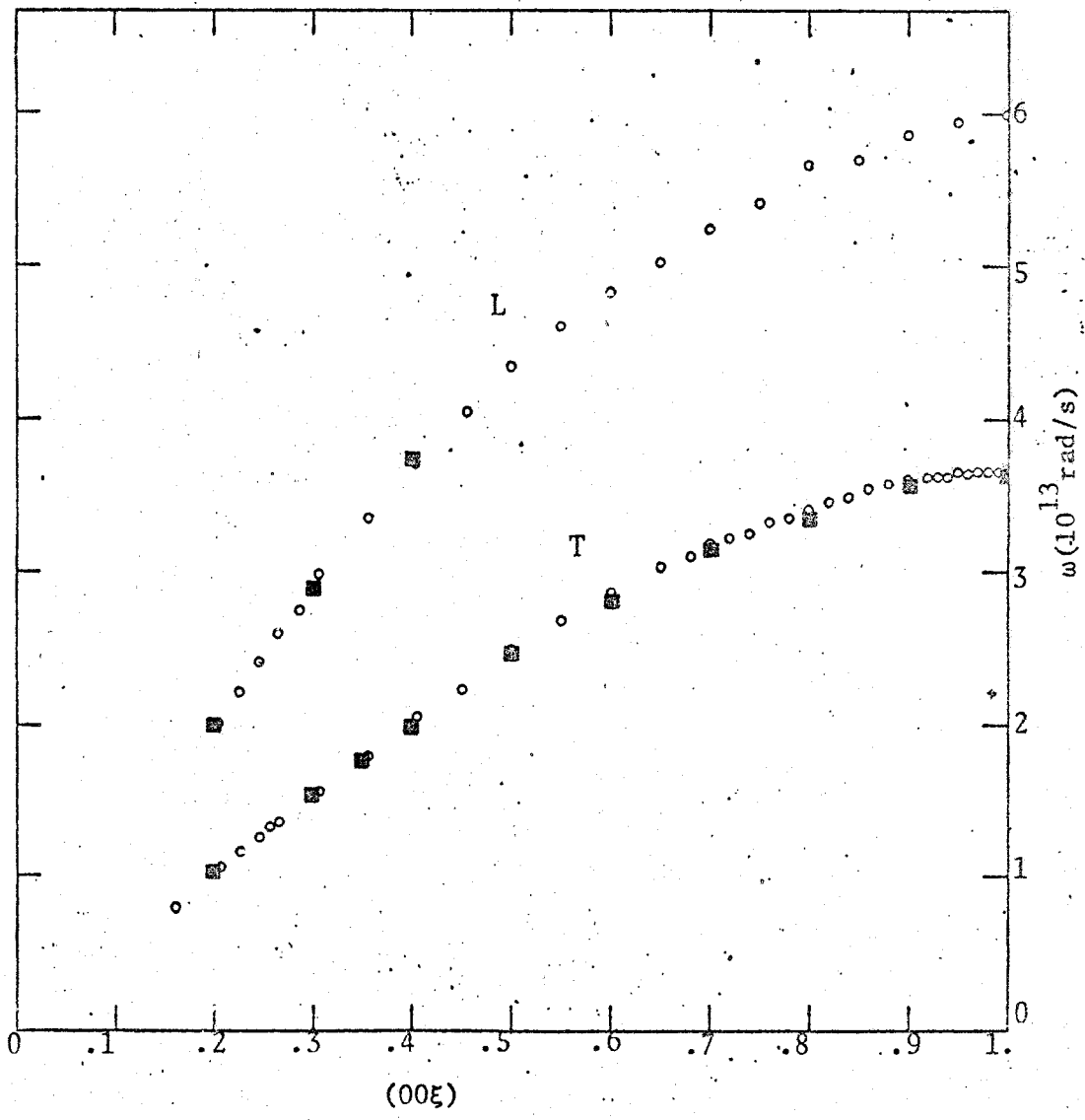
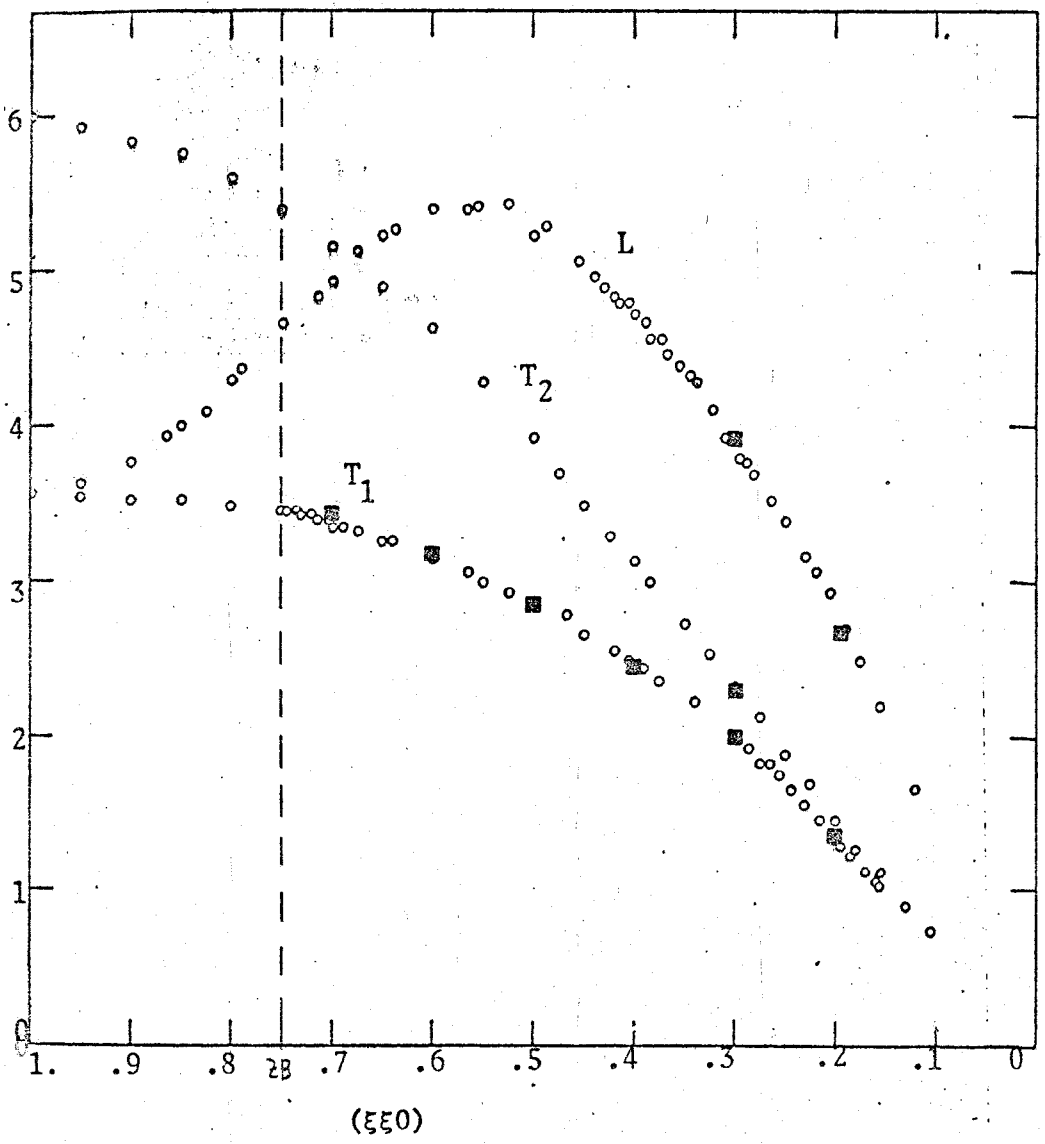


Figura (IV.1.4)- Relações de Dispersão do Alumínio à Temperatura Ambiente.

balho que permita o perfeito entendimento dos modelos teóricos e suas aplicações ao estudo de dinâmica de redes. Esse é um dos motivos pelo qual escolhemos o alumínio como tema de estudo, para o qual existem na literatura dados de relações de dispersão bem conhecidos.

A partir de ensaios preliminares sobre a aplicação de modelos aos nossos resultados experimentais, verificamos que há necessidade de pelo menos vinte pontos para definir cada ramo da curva de relação de dispersão. Ocorre porém que o tempo de medida de cada um desses pontos, utilizando o espectrômetro de três eixos do IPEN, é cerca de dez horas. Tendo em vista esse tempo longo, o fato da relação de dispersão do alumínio ser bem conhecida e, ainda, o principal objetivo do nosso trabalho, optamos por utilizar na análise dos modelos teóricos, os numerosos dados experimentais cedidos gentilmente por Yarnell e colaboradores⁽²⁰⁾ os quais estão em plena concordância com os vários pontos que obtivemos experimentalmente.

IV.2.1- CÁLCULO DA VELOCIDADE DE PROPAGAÇÃO DO SOM E DAS CONSTANTES ELÁSTICAS DO ALUMÍNIO, A PARTIR DAS CURVAS DE RELAÇÃO DE DISPERSÃO MEDIDAS EXPERIMENTALMENTE

A velocidade de propagação do som e as constantes elásticas são propriedades físicas do sólido que podem ser obtidas diretamente da curva de relação de dispersão medida experimentalmente.

Pode-se obter expressões simples relacionando as constantes elásticas com a velocidade do som e a densidade do material (ρ), escolhendo convenientemente as direções de propagação e polarizações. Para tanto basta substituir os valores escolhidos de \vec{q} e \vec{A} nas equações (II.5.10). Duas das direções de propagação que dão essas relações simples são: (00 ξ) e ($\xi\xi$ 0). A velocidade do som é dada por⁽²¹⁾ :

$$V = \frac{\omega}{q} \quad (\text{IV.2.1.1})$$

uma vez que para grandes comprimentos de onda ou para pequenos valores de q , a dispersão está ausente.

Para uma onda paralela à direção (00ξ) , $q_3 = q$ e $q_1 = q_2 = 0$. Nessas condições, $A_3 = A$ e $A_1 = A_2 = 0$ descreve uma onda longitudinal. A velocidade longitudinal será então dada por:

$$\rho V_L^2 = C_{11} \quad (\text{IV.2.1.2})$$

A velocidade V_T das ondas planas transversais ($A_3 = 0$) polarizadas em qualquer direção perpendicular ao eixo x_3 (ou z), é dada por:

$$\rho V_T^2 = C_{44} \quad (\text{IV.2.1.3})$$

Existe um interesse especial pelas ondas que se propagam na direção da face de um cristal cúbico (por exemplo, direção $(\xi\xi 0)$), porque as três constantes elásticas podem ser facilmente encontradas a partir das três velocidades de propagação. Para essa direção, $q_1 = q_2 = q/\sqrt{2}$ e $q_3 = 0$.

A velocidade V_L de uma onda longitudinal ($A_3 = 0$) é dada por:

$$\rho V_L^2 = \frac{1}{2} (C_{11} + C_{12} - 2C_{44}) \quad (\text{IV.2.1.4})$$

A velocidade V_{T1} , de uma onda transversal polarizada perpendicular ao eixo X_3 (ou z), ($A_3 = 0$) é dada por:

$$\rho V_{T1}^2 = \frac{1}{2} (C_{11} - C_{12}) \quad (\text{IV.2.1.5})$$

A velocidade V_{T2} de uma onda transversal polarizada paralela ao eixo X_3 ($A_1 = A_2 = 0$) é dada por:

$$\rho V_{T2}^2 = C_{44} \quad (\text{IV.2.1.6})$$

A velocidade de propagação do som para as direções (00ξ) e $(\xi\xi 0)$ em todas as polarizações, foi determinada a partir da figura (IV.1.4), na região de grandes comprimentos de onda (\vec{q} pe

queno), onde a variação de ω com \vec{q} é linear, conforme previsto pela equação (IV.2.1.1).

A tabela (IV.2.1) apresenta os valores encontrados para as velocidades de propagação do som nas direções citadas.

Direção	Polarização	Velocidade de Propagação do Som (cm/S)
(00ξ)	L	$V_L = (6,3 \pm 0,2) \cdot 10^5$
	T	$V_T = (3,3 \pm 0,1) \cdot 10^5$
(ξξ0)	L	$V_L = (6,5 \pm 0,2) \cdot 10^5$
	T ₁	$V_{T_1} = (3,0 \pm 0,1) \cdot 10^5$
	T ₂	$V_{T_2} = (3,2 \pm 0,1) \cdot 10^5$

Tabela (IV.2.1)

O valor das constantes elásticas do alumínio é obtido substituindo-se os valores da velocidade de propagação do som mostrados na tabela (IV.2.1) nas equações derivadas anteriormente, onde a densidade do alumínio (ρ) é igual a $2,702 \text{ g/cm}^3$.

Resolvendo o sistema das equações (IV.2.1.4), (IV.2.1.5) e (IV.2.1.6), obtém-se:

$$C_{11} = (11,0 \pm 0,6) \cdot 10^{11} \text{ dinas/cm}^2$$

$$C_{12} = (6,2 \pm 0,3) \cdot 10^{11} \text{ dinas/cm}^2$$

$$C_{44} = (2,8 \pm 0,1) \cdot 10^{11} \text{ dinas/cm}^2$$

(18)

Os resultados obtidos na literatura são mostrados na tabela (IV.2.2).

Constantes Elásticas em Unidades de 10^{11} dinas/cm ²	
C_{11}	= 10,92
C_{12}	= 6,40
C_{44}	= 3,04

Tabela IV.2.2

IV.3- DETERMINAÇÃO DAS CONSTANTES DE FORÇA

Para a determinação das constantes de força do alumínio a partir das curvas de relação de dispersão obtidas experimentalmente, foram utilizados dois modelos teóricos, a saber: o de Born-von Karman e o Axialmente Simétrico.

Primeiramente será considerado o modelo Born-von Karman ou tensorial. Como já foi mencionado no Capítulo II, a análise da relação de dispersão se fará considerando a aproximação harmônica.

Para se encontrar os valores das constantes de força do cristal é necessário ajustar à curva de dispersão medida experimentalmente, uma função $\omega = \omega(\vec{q})$ obtida por meio de modelos teóricos e que contenha essas constantes de força como parâmetros.

A função teórica procurada é solução da equação de autovalores (II.2.13). A fim de se encontrar o elemento de matriz $\phi_{\alpha\beta}(\vec{\ell})$ contido na equação (II.2.19) faz-se uso da expressão (II.4.1), que pode ser calculada num ponto da rede, desde que se conheça $[\phi_{\alpha\beta}(\vec{\ell})]$ num dado ponto particular da rede além da matriz que efetua a operação de rotação entre esses pontos $[T_{ij}]$. Como já foi visto no Capítulo II, ítem II.2, a matriz das constantes de força $[\phi_{\alpha\beta}(\vec{\ell})]$ é de ordem três e contém portanto nove elementos, sendo seis independentes.

A simetria do cristal permite reduzir o número desses elementos. Para tanto considera-se uma transformação unitária

(T_{ij}) que não muda a posição dos átomos em $\vec{\ell}$ e $\vec{\ell}'$; assim, a relação matricial que permite reduzir o número de elementos da matriz de constantes de força pode ser escrita na forma:

$$[\phi_{\alpha\beta}(\vec{\ell}-\vec{\ell}')] = (T_{ij}) [\phi_{\alpha\beta}(\vec{\ell}-\vec{\ell}')] (T_{ij})^t \quad (\text{IV.3.1})$$

Como exemplo do cálculo da matriz dinâmica será considerada uma rede cúbica de faces centradas, da qual trata o presente trabalho, com interações somente entre os átomos mais próximos ou a primeira camada de átomos (figura (IV.3.1)); isso porque o cálculo onde são consideradas as interações entre o átomo origem e a S-ésima camada de átomos, é feito de maneira análoga.

Na figura (IV.3.1) o átomo no centro do sistema de coordenadas é envolvido por uma camada de doze primeiros vizinhos e as coordenadas desses átomos são mostradas na tabela (IV.3.1), em função do parâmetro da rede $2a$.

Átomo	Coordenadas
0	(0,0,0)
1	(a,a,0)
2	(-a,a,0)
3	(a,-a,0)
4	(-a,-a,0)
5	(a,0,0)
6	(-a,0,a)
7	(a,0,-a)
8	(-a,0,-a)
9	(0,a,a)
10	(0,-a,a)
11	(0,a,-a)
12	(0,-a,a)

Tabela (IV.3.1)

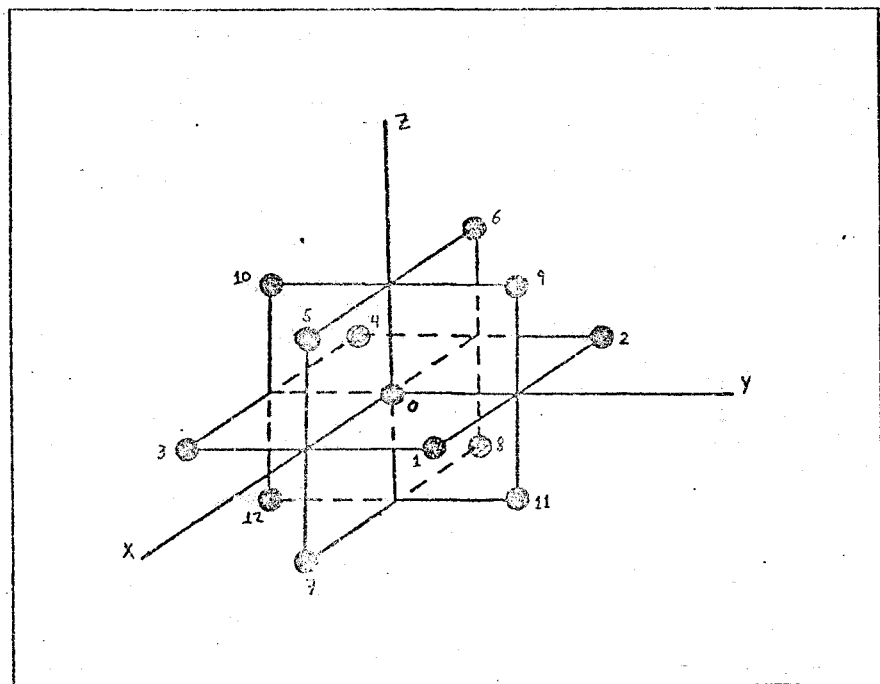


Figura (IV.3.1) -- Átomos Primeiros Vizinhos no Alumínio.

Para reduzir o número de elementos da matriz de constantes de força, vamos considerar a interação entre o átomo "0" e o átomo "1", que é representada na forma geral tensorial do seguinte modo:

$$\phi^1(0,1) = \begin{bmatrix} \alpha_1^1 & \beta_3^1 & \beta_2^1 \\ \beta_3^1 & \alpha_2^1 & \beta_1^1 \\ \beta_2^1 & \beta_1^1 & \alpha_3^1 \end{bmatrix} \quad (\text{IV.3.2})$$

Observa-se, entretanto, que o vetor (a,a,0) ligando estes dois átomos fica invariante ao ser efetuada uma reflexão no plano xy, sendo a matriz que representa essa operação dada por:

$$T_{(z=0)} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (\text{IV.3.3})$$

substituindo (IV.3.2) e (IV.3.3) em (IV.3.1):

$$\begin{bmatrix} \alpha_1^1 & \beta_3^1 & \beta_2^1 \\ \beta_3^1 & \alpha_2^1 & \beta_1^1 \\ \beta_2^1 & \beta_1^1 & \alpha_3^1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_1^1 & \beta_3^1 & \beta_2^1 \\ \beta_3^1 & \alpha_2^1 & \beta_1^1 \\ \beta_2^1 & \beta_1^1 & \alpha_3^1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} \alpha_1^1 & \beta_3^1 & -\beta_2^1 \\ \beta_3^1 & \alpha_2^1 & -\beta_1^1 \\ -\beta_2^1 & -\beta_1^1 & \alpha_3^1 \end{bmatrix}$$

Portanto, para que se tenha a igualdade acima é necessário que:

$$\beta_2^1 = \beta_1^1 = 0$$

e assim, a matriz simplificada por argumentos de simetria será

$$\phi^1(0,1) = \begin{bmatrix} \alpha_1^1 & \beta_3^1 & 0 \\ \beta_3^1 & \alpha_2^1 & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_3^1 \end{bmatrix} \quad (\text{IV.3.4})$$

Uma outra operação de simetria do cristal que deixa invariante o vetor $(a,a,0)$ é a reflexão no plano $x = y$, descrita pela matriz abaixo:

$$T_{(x=y)} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (\text{IV.3.5})$$

A partir da equação (IV.3.1) substituindo as igualdades (IV.3.4) e (IV.3.5), obtém-se:

$$\begin{bmatrix} \alpha_1^1 & \beta_3^1 & 0 \\ \beta_3^1 & \alpha_2^1 & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_3^1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_1^1 & \beta_3^1 & 0 \\ \beta_3^1 & \alpha_2^1 & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_3^1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \\ = \begin{bmatrix} \alpha_2^1 & \beta_3^1 & 0 \\ \beta_3^1 & \alpha_1^1 & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_3^1 \end{bmatrix}$$

o que implica

$$\alpha_1^1 = \alpha_2^1$$

Finalmente, a matriz das constantes de força que representa a interação entre os átomos "0" e "1" pode ser escrita na forma simplificada irreduzível:

$$\phi^1(0,1) = \begin{bmatrix} \alpha_1^1 & \beta_3^1 & 0 \\ \beta_3^1 & \alpha_1^1 & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_3^1 \end{bmatrix} \quad (\text{IV.3.7})$$

A partir da equação (II.4.1), pode-se agora encontrar a matriz das constantes de força para a interação entre o átomo "0" e cada um dos onze átomos restantes da camada.

Para a interação entre os átomos "0" e "2", a operação que representa a transformação da posição "1" para a posição "2" é uma reflexão no plano yz (figura (IV.3.1)). A matriz correspondente é:

$$T_{(x=0)} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (\text{IV.3.7})$$

Substituindo as matrizes (IV.3.6) e (IV.3.7) na expressão (IV.4.1):

$$\phi^1(0,2) = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_1^1 & \beta_3^1 & 0 \\ \beta_3^1 & \alpha_1^1 & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_3^1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\phi^1(0,2) = \begin{bmatrix} \alpha_1^1 & -\beta_3^1 & 0 \\ -\beta_3^1 & \alpha_1^1 & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_3^1 \end{bmatrix} \quad (\text{IV.3.8})$$

As outras matrizes que representam as operações de rotação entre o átomo "1" e os átomos da primeira camada, bem como as matrizes de constantes de força obtidas a partir da equação (II.4.1), são mostradas na tabela abaixo:

Átomo	Matriz T	Matriz de Constantes de Força
3	$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} \alpha_1^1 & -\beta_3^1 & 0 \\ -\beta_3^1 & \alpha_1^1 & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_3^1 \end{bmatrix}$
4	$\begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} \alpha_1^1 & \beta_3^1 & 0 \\ \beta_3^1 & \alpha_1^1 & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_3^1 \end{bmatrix}$
5	$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} \alpha_1^1 & 0 & \beta_3^1 \\ 0 & \alpha_3^1 & 0 \\ \beta_3^1 & 0 & \alpha_1^1 \end{bmatrix}$
6	$\begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} \alpha_1^1 & 0 & -\beta_3^1 \\ 0 & \alpha_3^1 & 0 \\ -\beta_3^1 & 0 & \alpha_1^1 \end{bmatrix}$
7	$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} \alpha_1^1 & 0 & -\beta_3^1 \\ 0 & \alpha_3^1 & 0 \\ -\beta_3^1 & 0 & \alpha_1^1 \end{bmatrix}$
8	$\begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} \alpha_1^1 & 0 & \beta_3^1 \\ 0 & \alpha_3^1 & 0 \\ \beta_3^1 & 0 & \alpha_1^1 \end{bmatrix}$
9	$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} \alpha_3^1 & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_1^1 & \beta_3^1 \\ 0 & \beta_3^1 & \alpha_1^1 \end{bmatrix}$
10	$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} \alpha_3^1 & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_1^1 & -\beta_3^1 \\ 0 & -\beta_3^1 & \alpha_1^1 \end{bmatrix}$
11	$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} \alpha_3^1 & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_1^1 & -\beta_3^1 \\ 0 & -\beta_3^1 & \alpha_1^1 \end{bmatrix}$
12	$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} \alpha_3^1 & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_1^1 & \beta_3^1 \\ 0 & \beta_3^1 & \alpha_1^1 \end{bmatrix}$

Tabela (IV.3.2)

A partir dos resultados já obtidos, pode-se calcular o elemento $D_{11}^1(\vec{q})$ da matriz dinâmica (equação (II.2.19)):

$$D_{11}^1(\vec{q}) = \frac{1}{M} \left[\alpha_1^1 \left[1 - e^{-i(q_x + q_y)} \right] + \alpha_1^1 \left[1 - e^{-i(-q_x + q_y)} \right] + \alpha_1^1 \left[1 - e^{-i(q_x - q_y)} \right] + \right. \\ \left. + \alpha_1^1 \left[1 - e^{-i(-q_x - q_y)} \right] + \alpha_1^1 \left[1 - e^{-i(q_x + q_z)} \right] + \alpha_1^1 \left[1 - e^{-i(-q_x + q_z)} \right] + \right. \\ \left. + \alpha_1^1 \left[1 - e^{-i(q_x - q_z)} \right] + \alpha_1^1 \left[1 - e^{-i(-q_x - q_z)} \right] + \alpha_3^1 \left[1 - e^{-i(q_y + q_z)} \right] + \right. \\ \left. + \alpha_3^1 \left[1 - e^{-i(-q_y + q_z)} \right] + \alpha_3^1 \left[1 - e^{-i(q_y - q_z)} \right] + \alpha_3^1 \left[1 - e^{-i(-q_y - q_z)} \right] \right]$$

portanto,

$$D_{11}^1(\vec{q}) = \frac{4}{M} \left[\alpha_1^1 (2 - \cos q_x \cdot \cos q_y - \cos q_x \cdot \cos q_z) + \alpha_3^1 (1 - \cos q_y \cdot \cos q_z) \right]$$

Os outros elementos da matriz dinâmica são obtidos efetuando um cálculo análogo.

$$D_{22}^1(\vec{q}) = \frac{4}{M} \left[\alpha_1^1 (2 - \cos q_x \cdot \cos q_y - \cos q_y \cdot \cos q_z) + \alpha_3^1 (1 - \cos q_x \cdot \cos q_z) \right]$$

$$D_{33}^1(\vec{q}) = \frac{4}{M} \left[\alpha_1^1 (2 - \cos q_x \cdot \cos q_z - \cos q_y \cdot \cos q_z) + \alpha_3^1 (1 - \cos q_x \cdot \cos q_y) \right]$$

$$D_{12}^1(\vec{q}) = D_{21}^1(\vec{q}) = \frac{4}{M} \beta_3^1 \sin q_x \cdot \sin q_y$$

$$D_{13}^1(\vec{q}) = D_{31}^1(\vec{q}) = \frac{4}{M} \beta_3^1 \sin q_x \cdot \sin q_z$$

$$D_{23}^1(\vec{q}) = D_{32}^1(\vec{q}) = \frac{4}{M} \beta_3^1 \sin q_y \cdot \sin q_z$$

A tabela (IV.3.3) mostra as matrizes de constantes de força para as cinco primeiras camadas de átomos, explicitando a qual interação se refere cada matriz.

Camada	Coordenada do Átomo que Interage com o Átomo em (0,0,0)	Matriz Constante de Força	Nº de Átomos da camada
1	(a, a, 0)	$\begin{bmatrix} \alpha_1^1 & \beta_3^1 & 0 \\ \beta_3^1 & \alpha_1^1 & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_3^1 \end{bmatrix}$	12
2	(2a, 0, 0)	$\begin{bmatrix} \alpha_1^2 & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_2^2 & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_2^2 \end{bmatrix}$	6
3	(2a, a, a)	$\begin{bmatrix} \alpha_1^3 & \beta_2^3 & \beta_2^3 \\ \beta_1^3 & \alpha_2^3 & \beta_1^3 \\ \beta_2^3 & \beta_1^3 & \alpha_2^3 \end{bmatrix}$	24
4	(2a, 2a, 0)	$\begin{bmatrix} \alpha_1^4 & \beta_3^4 & 0 \\ \beta_3^4 & \alpha_1^4 & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_3^4 \end{bmatrix}$	12
5	(3a, a, 0)	$\begin{bmatrix} \alpha_1^5 & \beta_3^5 & 0 \\ \beta_3^5 & \alpha_2^5 & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_3^5 \end{bmatrix}$	24

Tabela (IV.3.3)

O elemento $D_{ij}(\vec{q})$ da matriz dinâmica Born-von Karman que corresponde às interações até a quinta camada de átomos, será dada por:

$$D_{ij}(\vec{q}) = \sum_{S=1}^5 D_{ij}^S(\vec{q}) \quad (\text{IV.3.9})$$

onde $D_{ij}^S(\vec{q})$ é o elemento (i,j) da matriz dinâmica para interações entre o átomo origem e a S-ésima camada de átomos. Portanto, da equação (IV.3.9) pode-se escrever:

$$\begin{aligned} D_{11}(\vec{q}) = \frac{1}{M} & \left[4\alpha_1 (2 - \cos q_x \cos q_y - \cos q_x \cos q_z) + 4\alpha_3 (1 - \cos q_y \cos q_z) + \right. \\ & + 2\alpha_2^2 (2 - \cos 2q_y - \cos 2q_z) + 8\alpha_1^3 (1 - \cos 2q_x \cos q_y \cos q_z) + \\ & + 8\alpha_2^3 (2 - \cos q_x \cos 2q_y \cos q_z - \cos q_x \cos q_y \cos 2q_z) + \\ & + 4\alpha_1^4 (2 - \cos q_x \cos q_y - \cos q_x \cos q_z) + 4\alpha_3^4 (1 - \cos q_y \cos q_z) + \\ & + 4\alpha_1^5 (2 - \cos 3q_x \cos q_y - \cos 3q_x \cos q_z) + 4\alpha_2^5 (2 - \cos q_x \cos 3q_y - \cos q_x \cos 3q_z) + \\ & \left. + 4\alpha_3^5 (2 - \cos q_y \cos 3q_z - \cos 3q_y \cos q_z) \right] \quad (\text{IV.3.10}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} D_{12}(\vec{q}) = \frac{1}{M} & \left[4\beta_3 \sin q_x \sin q_y + 8\beta_1^3 \sin q_x \sin q_y \cos 2q_y + 8\beta_2^3 (\sin 2q_x \sin q_y \cos q_z + \right. \\ & \left. + \sin q_x \sin 2q_y \cos q_z) + 4\beta_3^4 \sin q_x \sin q_y + 4\beta_3^5 (\sin 3q_x \sin q_y + \sin q_x \sin 3q_y) \right] \quad (\text{IV.3.11}) \end{aligned}$$

O elemento D_{22} (D_{33}) pode ser encontrado a partir de D_{11} (D_{22}) trocando-se x por y, y por z e z por x. Analogamente, o elemento D_{23} (D_{13}) também pode ser obtido a partir de D_{12} (D_{23}) por uma permutação cíclica de x, y e z. Vale ainda ressaltar que a matriz é simétrica, como já foi demonstrado no Capítulo II, item II.2.

Vejamos agora o modelo Axialmente Simétrico. Nesse modelo há duas constantes de força axialmente simétricas para cada camada de átomos considerada na interação.

Por questões de simplicidade, determina-se as constantes de força axialmente simétricas em função das constantes de força tensoriais, pois esse procedimento permite a utilização da matriz dinâmica calculada para o modelo Born-von Karman ou tensorial.

Para interações até a primeira camada de átomos, a relação entre essas constantes de força pode ser obtida considerando a interação entre o átomo "0" e o átomo "1", efetuando uma rotação de 45° em torno do eixo z, de tal forma que o eixo x coincida com a direção de ligação desses átomos.

A matriz que executa essa rotação é dada por:

$$T_{(45)} = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (\text{IV.3.12})$$

Quando uma rotação é aplicada à matriz $\phi^1(0,1)$ dada pela equação (IV.3.6), obtém-se:

$$\begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 & 0 \\ -\sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_1^1 & \beta_3^1 & 0 \\ \beta_3^1 & \alpha_1^1 & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_3^1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 & -\sqrt{2}/2 & 0 \\ \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha_1^1 + \beta_3^1 & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_1^1 - \beta_3^1 & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_3^1 \end{bmatrix} \quad (\text{IV.3.13})$$

Para que se tenha forças axialmente simétricas, comparando a matriz (IV.3.12) com a matriz (II.3.2), deve-se ter:

$$\alpha_3^1 = \alpha_1^1 - \beta_3^1 \quad (\text{IV.3.14})$$

onde as constantes de força axialmente simétricas são dadas em função das constantes de força tensoriais como:

$$A^1 = \alpha_1^1 + \beta_3^1$$

$$B^1 = \alpha_1^1 - \beta_3^1$$

A expressão (IV.3.14) é a restrição do modelo axialmente simétrico às constantes de força tensoriais, para interações até a primeira camada de átomos.

A tabela (IV.3.14) mostra, para as cinco primeiras camadas de átomos centradas na origem, as constantes de força tensoriais, as restrições a elas impostas pelo modelo Axialmente Simétrico e as constantes de força axialmente simétricas.

Conforme já foi citado, para se obter a função teórica $\omega = \omega(\vec{q})$ é necessário resolver a equação de autovalores (II.2.13). Isto se torna uma tarefa fácil quando a função é calculada para as direções de mais alta simetria do cristal. Para o alumínio (FCC) de que trata o presente trabalho, essas direções são (00ξ) e $(\xi\xi 0)$.

A fim de encontrar os autovalores da matriz $[D(\vec{q})]$, para cada uma das direções mencionadas, é suficiente multiplicá-las pelo correspondente autovetor de cada modo excitado.

A tabela (IV.3.5) mostra os autovetores para os cinco ramos da curva de relação de dispersão medida experimentalmente.

CONSTANTES DE FORÇA

Camada	Modelo Tensorial (Born-von Karman)	Restrições Pelo Modelo Axialmen te Simétrico	Modelo Axialmen te Simétrico
1	α_1^1 α_3^1 β_3^1	$\alpha_3^1 = \alpha_1^1 - \beta_3^1$	A^1 B^1
2	α_1^2 α_2^2	-	A^2 B^2
3	α_1^3 α_2^3 β_1^3 β_2^3	$\beta_1^3 = \frac{1}{3}(\alpha_1^3 - \alpha_2^3)$ $\beta_2^3 = \frac{2}{3}(\alpha_1^3 - \alpha_2^3)$	A^3 B^3
4	α_1^4 α_3^4 β_3^4	$\alpha_3^4 = \alpha_1^4 - \beta_3^4$	A^4 B^4
5	α_1^5 α_2^5 α_3^5 β_3^5	$\alpha_3^5 = \frac{1}{8}(9\alpha_2^5 - \alpha_1^5)$ $\beta_3^5 = \frac{3}{8}(\alpha_1^5 - \alpha_2^5)$	A^5 B^5

Tabela (IV.3.4)

Direção	Polarização	Autovetor
(00ξ)	L	(0,0,1)
	T	(0,1,0) (1,0,0)
(ξξ0)	L	(1,1,0)
	T ₁	(1,-1,0)
	T ₂	(0,0,1)

Tabela (IV.3.5)

Vamos escrever a matriz dinâmica na seguinte forma:

$$D(\vec{q}) = \begin{bmatrix} D_{11} & D_{12} & D_{13} \\ D_{12} & D_{22} & D_{23} \\ D_{13} & D_{23} & D_{33} \end{bmatrix}$$

onde foi suprimida, por simplicidade, a indicação da dependência de cada elemento com \vec{q} .

Para um fonon se propagando na direção (00ξ) ($q_x=q_y=0$), a matriz dinâmica pode ser escrita na forma diagonal

$$D(\vec{q}) = \begin{bmatrix} D_{11} & 0 & 0 \\ 0 & D_{11} & 0 \\ 0 & 0 & D_{33} \end{bmatrix}$$

sendo os quadrados das frequências dos modos longitudinal (ω_L^2) e transversal (ω_T^2) dados por:

$$\omega_L^2 \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D_{11} & 0 & 0 \\ 0 & D_{11} & 0 \\ 0 & 0 & D_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$= D_{33} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$\omega_L^2 = D_{33}$$

(IV.3.15)

$$\omega_T^2 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D_{11} & 0 & 0 \\ 0 & D_{11} & 0 \\ 0 & 0 & D_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$= D_{11} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\omega_T^2 = D_{11}$$

(IV.3.16)

Nota-se que teoricamente poder-se-ia obter dois modos transversais, mas no caso da direção (00ξ) esses modos são degenerados, como pode ser visto resolvendo a equação de autovalores para o autovetor (0,1,0).

Analogamente, para um fonon que se propaga segundo a direção (ξξ0) ($q_x=q_y$ e $q_z=0$), a matriz dinâmica pode ser escrita na forma:

$$D(\vec{q}) = \begin{bmatrix} D_{11} & D_{12} & 0 \\ D_{12} & D_{11} & 0 \\ 0 & 0 & D_{33} \end{bmatrix}$$

e o quadrado das frequências dos modos longitudinal (ω_L^2) e transversais (ω_{T1}^2 e ω_{T2}^2) dados por:

$$\begin{aligned} \omega_L^2 \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} D_{11} & D_{12} & 0 \\ D_{12} & D_{11} & 0 \\ 0 & 0 & D_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \\ &= (D_{11} + D_{12}) \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

$$\omega_L^2 = D_{11} + D_{12}$$

(II.3.17)

$$\omega_{T1}^2 \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D_{11} & D_{12} & 0 \\ D_{12} & D_{11} & 0 \\ 0 & 0 & D_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\omega_{T1}^2 = D_{11} - D_{12}$$

(IV.3.18)

$$\omega_{T_2}^2 \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D_{11} & D_{12} & 0 \\ D_{12} & D_{11} & 0 \\ 0 & 0 & D_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$= D_{33} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$\omega_{T_2}^2 = D_{33}$$

(IV.3.19)

Nas direções (00ξ) e (ξξ0), as funções (IV.3.15), (IV.3.16), (IV.3.17), (IV.3.18) e (IV.3.19) relacionam a curva $\omega = \omega(\vec{q})$ com as constantes de força do cristal. A partir disso, vê-se que é possível obter as constantes de força do cristal efetuando um ajuste pelo método dos mínimos quadrados não linear⁽¹⁶⁾ de cada função citada acima com o respectivo ramo da curva obtida experimentalmente.

Tendo em vista que cada parâmetro das funções $\omega = \omega_j(\vec{q})$ é uma combinação linear de constantes de força, ao se aplicar o método para o ajuste dessas aos pontos experimentais, obtém-se um sistema de equações onde as incógnitas são as constantes de força do cristal. Porém, no modelo Born-von Karman para interações entre o átomo origem e as cinco primeiras camadas de átomos que o envolve, o sistema linear obtido é indeterminado quando se usa as direções de simetria (00ξ) e (ξξ0), uma vez que possui mais incógnitas do que equações. Para que o sistema tenha uma única solução, deve-se adicionar equações linearmente independentes que são as relações entre constantes de força e constantes elásticas.

Fazendo na matriz dinâmica do cristal real o limite para grandes comprimentos de onda (pequenos vetores de onda \vec{q}) e

comparando-a com a matriz dinâmica para um meio contínuo com simetria cúbica (equação (II.5.12) deduzida no Capítulo II, ítem II.5, obtém-se as seguintes relações entre as constantes de força e constantes elásticas:

$$2aC_{11} = 4\alpha_1^1 + 4\alpha_1^2 + 16\alpha_1^3 + 8\alpha_2^3 + 16\alpha_1^4 + 36\alpha_1^5 + 4\alpha_2^5$$

$$2aC_{44} = 2\alpha_1^1 + 2\alpha_3^1 + 4\alpha_2^2 + 4\alpha_1^3 + 20\alpha_2^3 + 8\alpha_1^4 + 8\alpha_3^4 + 2\alpha_1^5 + 18\alpha_2^5 + 20\alpha_3^5$$

$$2a(C_{12} + C_{44}) = 4\beta_3^1 + 8\beta_1^3 + 32\beta_2^3 + 16\beta_3^4 + 24\beta_3^5$$

(IV.3.20)

onde $2a$ é o parâmetro da rede cúbica de faces centradas.

Os valores das constantes de força tensoriais bem como os das constantes de força axialmente simétricas, obtidas para o alumínio pelos modelos Born-von Karman e Axialmente Simétrico, respectivamente, são mostrados na tabela (IV.3.6).

A figura (IV.3.2) mostra a relação de dispersão calculada para o alumínio pelos modelos Born-von Karman e Axialmente Simétrico, considerando interações entre o átomo origem e as cinco primeiras camadas de átomos que o envolve.

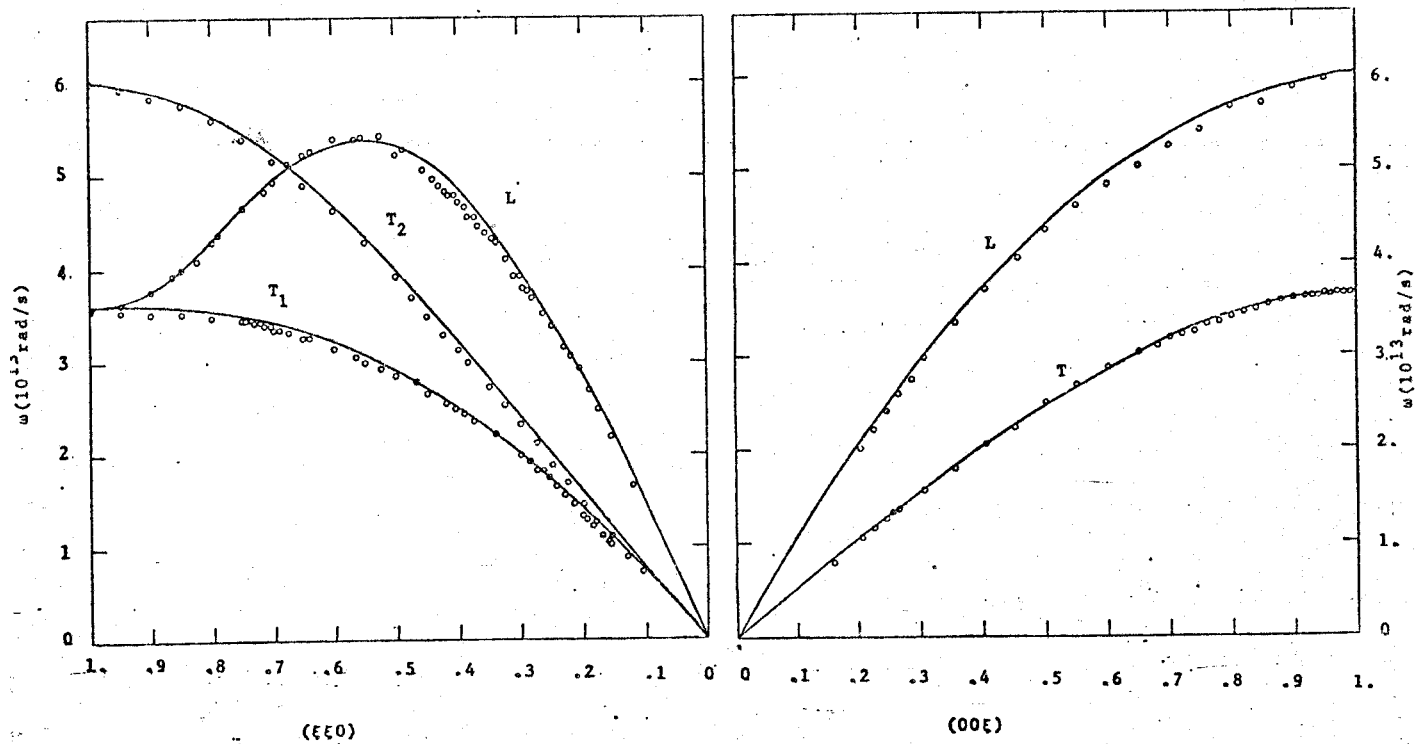
A tabela (IV.3.6) apresenta os valores das constantes de força dos tipos tensorial e axialmente simétrico, obtidas a partir das curvas de dispersão medidas experimentalmente para o alumínio à 300K. Nos modelos aplicados foram consideradas as interações entre o átomo origem e as cinco primeiras camadas de átomos que o envolve. A terceira e quarta colunas da tabela (IV.3.6) mostram os resultados obtidos para as constantes de força tensoriais utilizando os modelos Born-von Karman e Axialmente Simétrico, respectivamente. Na comparação entre os valores das constantes de força relacionadas na terceira e quarta colunas notam-se valores não coincidentes, porém o que é utilizado nos cálculos é a combinação linear desses valores para a determinação dos parâmetros da função frequência das vibrações cristalinas. Essa função é usada para reproduzir teoricamente as relações de dis

persão, cujas curvas calculadas por meio dos modelos citados podem ser vistas na figura (IV.3.2) em boa concordância com os pontos experimentais. Os resultados dos cálculos usando o modelo Axialmente Simétrico mostram que para o alumínio pode-se utilizar simetria axial para o estudo das forças interatômicas. A quinta coluna da tabela (IV.3.6) apresenta os valores obtidos para as constantes de força axialmente simétricas calculadas a partir do modelo Axialmente Simétrico e a figura (IV.3.2) mostra a relação de dispersão para o alumínio a 300K calculada nas direções $(\xi\xi 0)$ e (00ξ) pelos modelos mencionados acima, bem como os pontos experimentais obtidos por Yarnell et al⁽²⁰⁾.

Camada	CONSTANTES DE FORÇA (dinas/cm)			
		TIPO TENSORIAIS		TIPO AXIALMENTE-SIMÉTRICAS
		Modelo Born-von Karman	Modelo Axialmente-Simétrico	Modelo Axialmente-Simétrico
1	α_1^1	10253	10004	----
	α_3^1	-2549	-1903	----
	β_3^1	10570	11907	----
	A^1	----	----	21911
	B^1	----	----	-1903
2	α_1^2	2806	2828	----
	α_2^2	1740	1426	----
	A^2	----	----	2828
	B^2	----	----	1426
3	α_1^3	113	-169	----
	α_2^3	-300	-256	----
	β_1^3	156	29	----
	β_2^3	27	58	----
	A^3	----	----	-111
	B^3	----	----	-285
4	α_1^4	-591	-547	----
	α_3^4	-44	-19	----
	β_3^4	-340	-528	----
	A^4	----	----	-1075
	B^4	----	----	-19
5	α_1^5	282	282	----
	α_2^5	77	33	----
	α_3^5	-43	2	----
	β_3^5	0	93	----
	A^5	----	----	313
	B^5	----	----	2

Tabela (IV.3.6)

Modelo Born-von Karman



Modelo Axialmente Simétrico

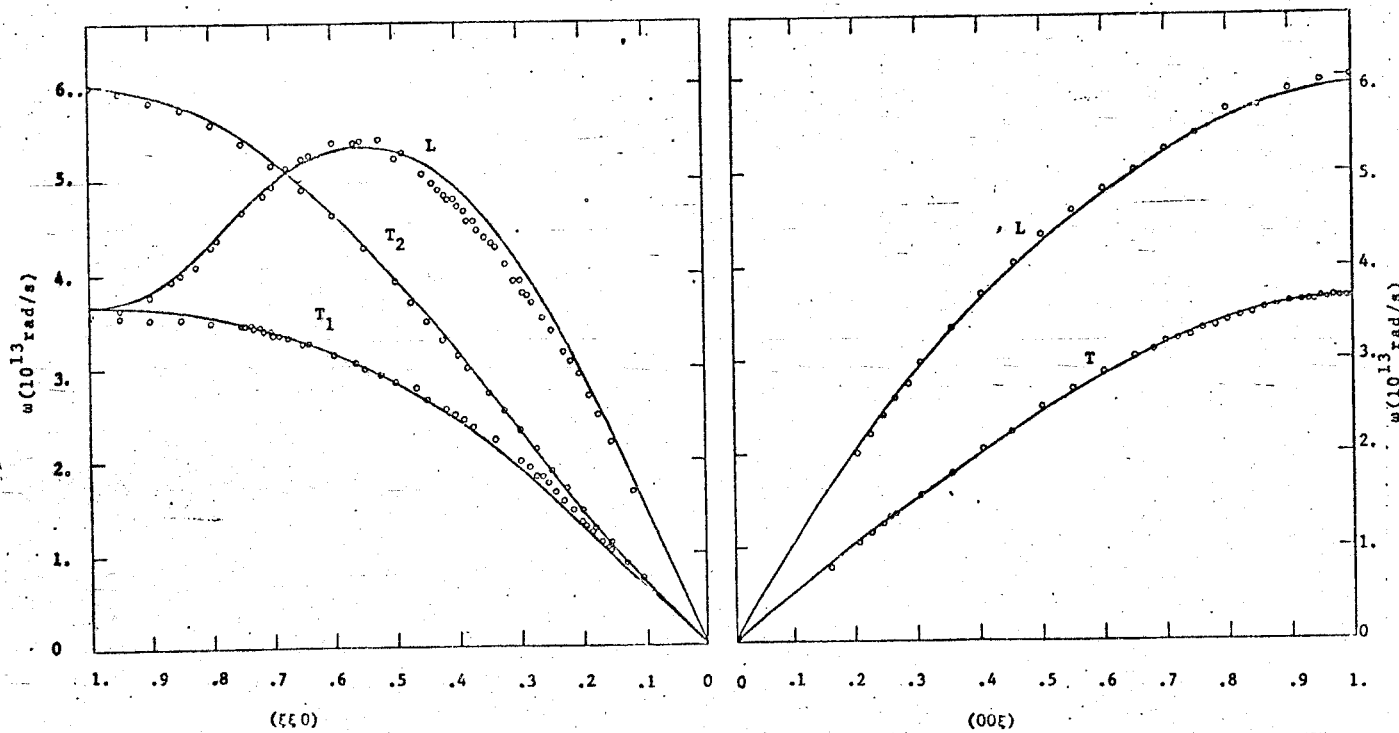


Figura (IV.3.2)- Relações de Dispersão Calculadas pelos Modelos Born-von Karman e Axialmente Simétrico.

V. CONCLUSÕES

O emprego da técnica de medidas do espalhamento coerente inelástico de nêutrons lentos por uma amostra monocristalina, utilizando um Espectrômetro de Cristal de Três Eixos, é sem dúvida a maneira mais apropriada para o estudo de dinâmica de redes cristalinas.

O desenvolvimento da presente dissertação ofereceu a oportunidade de abordar, de maneira pormenorizada, todos os aspectos básicos sobre a teoria e a prática da medida de picos de fônons em cristais. A partir da descrição das medidas e dos resultados experimentais apresentados nos Capítulos III e IV, fica evidenciado o pleno domínio que se tem sobre esse tipo de medida, podendo ser programado o desenvolvimento de medidas de relações de dispersão inéditas.

O estudo de dinâmica de redes cristalinas é sempre dirigido de maneira a se determinar propriedades físicas dos sólidos em estudo, o que é alcançado por meio do ajuste de modelos teóricos às curvas de dispersão obtidas experimentalmente.

Nessas condições, além da parte experimental de medidas de relações de dispersão, foi desenvolvido no presente trabalho, um estudo pormenorizado sobre os modelos teóricos de vibrações de redes cristalinas, sobre a interação de nêutrons lentos com os sistemas organizados de átomos e sobre o tratamento dos resultados experimentais à luz dessas teorias.

Tendo em vista esses objetivos, escolheu-se o alumínio como amostra tema desse trabalho, por ser um metal com sistema cristalino simples (Fcc), possuir propriedades físicas e relação de dispersão medidas com grande precisão, e ainda pelo fato de possuímos cristais em geometrias adequadas para efetuar medidas com o Espectrômetro de Cristal de Três Eixos do IPEN.

Nos trabalhos com o alumínio, foram estudados os modelos teóricos de Born-von Karman e o Axialmente Simétrico, ambos apoiados na aproximação adiabática, a partir dos quais foi possível

vel determinar as funções frequência das vibrações cristalinas $\omega = \omega(\vec{q})$ nas principais direções de simetria, a partir das quais foram obtidas as constantes de força do alumínio.

No caso de metais cujo potencial devido à interação entre os átomos pode ser descrito de uma maneira axialmente simétrica, deve-se aplicar o modelo Axialmente Simétrico. No Capítulo II, pode ser visto que esse procedimento implica em grande simplificação com relação à aplicação do modelo Born-von Karman, obtendo-se a partir desse cálculo simplificado uma boa representação da relação de dispersão.

A utilização do modelo Born-von Karman foi feita considerando-se a interação entre um dado átomo e as cinco primeiras camadas de átomos que o envolve. Nesse caso a determinação das constantes de força do alumínio, requer que sejam efetuadas as medidas das curvas de dispersão em três direções de simetria do cristal. Entretanto, no presente trabalho, foi utilizado um artifício pelo qual são utilizadas as medidas das curvas de dispersão segundo apenas duas direções de simetria $(\xi\xi 0)$ e (00ξ) , e usando ainda as relações entre as constantes de força tensoriais e as constantes elásticas determinadas a partir das duas curvas medidas. Os resultados obtidos por meio desse procedimento estão concordantes com os resultados experimentais como pode ser visto no Capítulo IV.

Nesse Capítulo IV está também descrita a determinação experimental das constantes elásticas do alumínio, feita a partir de valores da velocidade de propagação do som no cristal ao longo das direções $(\xi\xi 0)$ e (00ξ) , obtidas diretamente das curvas de dispersão. Essas constantes se comparam com os valores existentes na literatura (Tabela (IV.2.2)).

Salientamos que resolvendo a equação de autovalores (II.2.13) foi obtida a função $\omega = \omega(\vec{q})$ que descreve as curvas de dispersão ao longo de qualquer direção no alumínio. Essa função fica inteiramente determinada porque contém combinações lineares de constantes de força como parâmetros. O conhecimento dessa função permite, por exemplo, o cálculo das propriedades térmicas do alumínio.

Um resultado que pode ser obtido a partir de interpretação da Tabela (IV.3.6) de resultados das constantes de força, é que a energia potencial devido à interação interatômica no alumínio apresenta um mínimo entre o átomo considerado e os primeiros átomos vizinhos. Ainda em função das coordenadas de posição, a energia potencial decresce rapidamente em módulo à medida que se caminha em direção aos átomos vizinhos mais distantes.

A presente dissertação procurou abordar de maneira minuciosa os assuntos relacionados com tratamento de dados experimentais e aplicação de modelos teóricos de modo a se obter propriedades físicas de sólidos, tendo-se tido a preocupação de apresentar informações fundamentais e necessárias para qualquer outro tipo de estudo sobre metais que venha a ser desenvolvido no IPEN, no campo de dinâmica de redes cristalinas por meio da técnica de espalhamento coerente inelástico de nêutrons lentos.

APÊNDICE I

A.I.1- REDE RECÍPROCA E PRIMEIRA ZONA DE BRILLOUIN DE UM CRISTAL CÚBICO DE FACES CENTRADAS

Dados os vetores primitivos de translação de uma rede cúbica de faces centradas (FCC)

$$\vec{a} = \frac{1}{2}a (\hat{x} + \hat{y})$$

$$\vec{b} = \frac{1}{2}a (\hat{y} + \hat{z})$$

$$\vec{c} = \frac{1}{2}a (\hat{z} + \hat{x})$$

onde a representa o parâmetro da rede, pode-se construir a rede FCC: para tanto devem ser definidos⁽¹¹⁾ os vetores de translação \vec{A} , \vec{B} e \vec{C} por meio das expressões abaixo:

$$\vec{A} = 2\pi \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}} = \frac{2\pi}{a} (\hat{x} + \hat{y} - \hat{z})$$

$$\vec{B} = 2\pi \frac{\vec{c} \times \vec{a}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}} = \frac{2\pi}{a} (-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})$$

$$\vec{C} = 2\pi \frac{\vec{a} \times \vec{b}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}} = \frac{2\pi}{a} (\hat{x} - \hat{y} + \hat{z})$$

A recíproca de uma rede cúbica de faces centradas é uma rede cúbica de corpo centrado com parâmetro igual a $2\pi/a$.

A primeira zona de Brillouin é a célula de Wigner-Seitz da rede recíproca. É construída considerando um ponto da rede como origem e tomando planos perpendiculares ao ponto médio da reta que une esse ponto aos seus vizinhos mais próximos na rede. O menor volume resultante da intersecção desses planos é denominado primeira zona de Brillouin.

A figura (A.I.1) mostra a primeira zona de Brillouin de uma rede cúbica de faces centradas, inscrita numa célula unitária da rede recíproca da referida rede.

A.I.2- FATOR DE ESTRUTURA PARA REDE (FCC)

O fator de estrutura, $F(hk\ell)$, de uma estrutura cúbica de faces centradas composta por átomos iguais, é como mostrado abaixo:

$$F(hk\ell) = 4f \quad \text{se } h, k \text{ e } \ell \text{ são todos pares ou todos ímpares}$$

$$F(hk\ell) = 0 \quad \text{no caso contrário} \quad (\text{A.I.1})$$

onde f é um número diferente de zero.

O fator de estrutura é importante porque F^2 é diretamente proporcional à intensidade de nêutrons medida. A partir das expressões (A.I.1) é possível determinar as reflexões proibidas numa estrutura cúbica de faces centradas.

As figuras (A.I.2) e (A.I.3) mostram para os planos $(1\bar{1}0)$ e (100) , respectivamente, o contorno dos limites das primeiras zonas de Brillouin, bem como os planos de índices de Miller $(hk\ell)$ que correspondem a reflexões permitidas para uma estrutura cúbica de faces centradas.

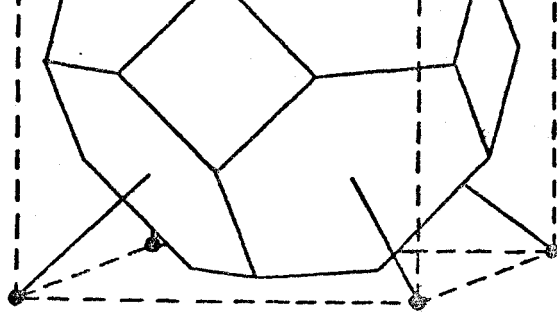


Figura (A.I.1)- 1a. Zona de Brillouin.

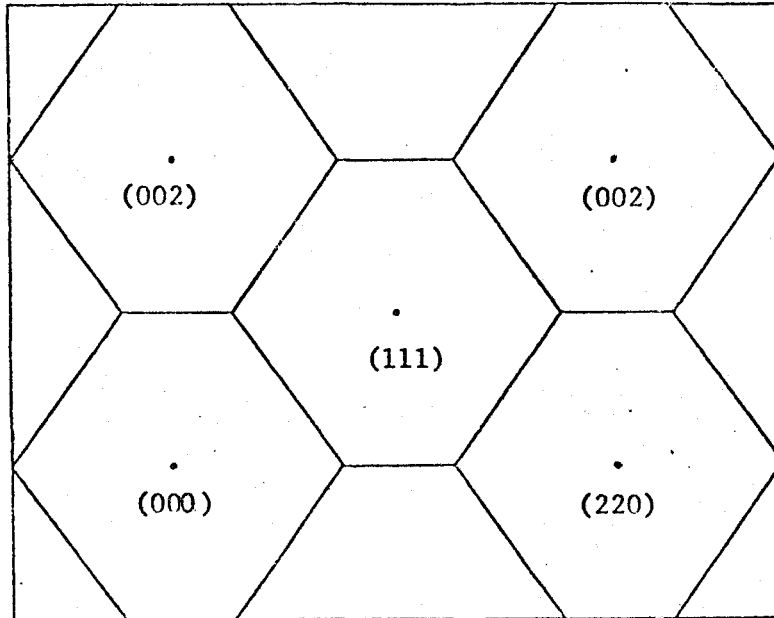


Figura (A.I.2)- Corte do Plano $(1\bar{1}0)$

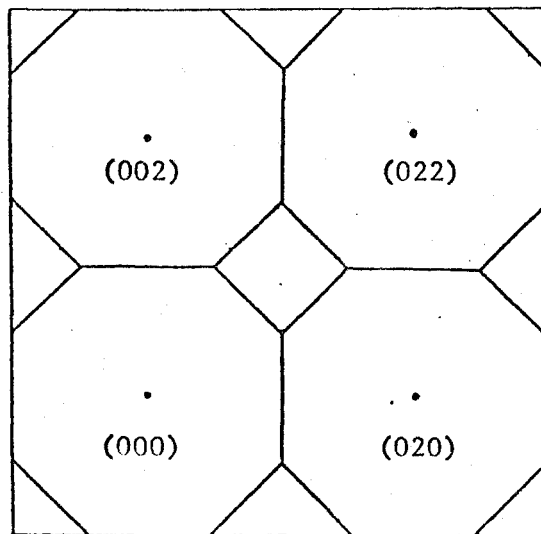


Figura (A.I.3)- Corte ddo

APENDICE IIA.II.1- CONDIÇÕES DE FOCALIZAÇÃO PARA MEDIDAS DE PICOS DE FONONS⁽⁸⁾

A medida de pico de fonons com um espectrômetro de três eixos é afetada pelas contribuições da resolução de cada um dos colimadores e também pela largura de mosaico dos cristais monocromador e analisador. Um pequeno alargamento do feixe de nêutrons incidente provocado pela divergência angular dos colimadores com a estrutura de mosaico do cristal monocromador, provoca um alargamento na energia dos nêutrons monocromáticos que alcançam a amostra. Os extremos dos vetores de onda dos nêutrons do feixe ocupam uma fina elipse no espaço energia-momento. Uma elipse semelhante é definida pelos extremos dos vetores de onda dos nêutrons que alcançam o cristal analisador. O efeito da resolução no alargamento de um pico de fonons pode ser minimizado ajustando-se a orientação dessas duas elipses relativamente à superfície de dispersão. As condições necessárias para a otimização são as chamadas condições de focalização. A orientação pode ser obtida focalizando-se individualmente o monocromador e o analisador.

Considerando somente a colimação finita, desprezando-se os efeitos devidos à largura de mosaico, o feixe monocromático incidente que alcança a amostra tem momento entre \vec{k}_0 e $\vec{k}_0 + \delta\vec{k}_0$.

A condição de Bragg para o monocromador é:

$$\vec{k}_0 \cdot \vec{d}_0 = \text{cte} \quad (\text{A.II.1.1})$$

onde \vec{d}_0 é um vetor normal aos planos de reflexão com módulo igual à distância interplanar. Por diferenciação da equação (A.II.1.1),

$$\vec{d}_0 \cdot \delta\vec{k}_0 = 0 \quad (\text{A.II.1.2})$$

nota-se que a elipse definida pelos extremos dos vetores $\vec{k}_0 + \delta\vec{k}_0$ é normal a \vec{d}_0 , isto é, paralela aos planos do monocromador (figura (A.II.1.1)).

O monocromador está focalizado quando, de todos os possíveis vetores de onda entre \vec{k}_0 e $\vec{k}_0 + \delta\vec{k}_0$, um número máximo de vetores de onda originam um mesmo vetor de onda \vec{k}_1 , após o espalhamento pela amostra.

Vamos considerar as equações que expressam a conservação da energia e quantidade de movimento para processos de criação de um fonon.

$$\vec{Q} = \vec{k}_0 - \vec{k}_1 = \vec{g} - \vec{q} \quad (\text{A.II.1.3})$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} (k_0^2 - k_1^2) = \hbar\omega(\vec{q}) \quad (\text{A.II.1.4})$$

onde $\hbar\omega$ é a energia de um fonon, \vec{k}_0 e \vec{k}_1 são os vetores de onda incidente e espalhado, respectivamente, e m é a massa do nêutron.

Derivando as equações (A.II.1.3) e (A.II.1.4) com relação a \vec{k}_0 e mantendo \vec{k}_1 fixo, obtém-se uma restrição em $\delta\vec{k}_0$ para que todos os nêutrons espalhados pela amostra em uma particular direção tenham a mesma energia.

$$\delta\vec{k}_0 = \delta\vec{q} \quad (\text{A.II.1.5})$$

e

$$\frac{\hbar}{m} \vec{k}_0 \cdot \vec{k}_0 = \vec{v}_\omega \cdot \delta\vec{k}_0 \quad (\text{A.II.1.6})$$

Definindo $\vec{g} = \frac{m}{\hbar} \vec{v}_\omega$, obtém-se:

$$(\vec{g} - \vec{k}_0) \cdot \delta\vec{k}_0 = 0 \quad (\text{A.II.1.7})$$

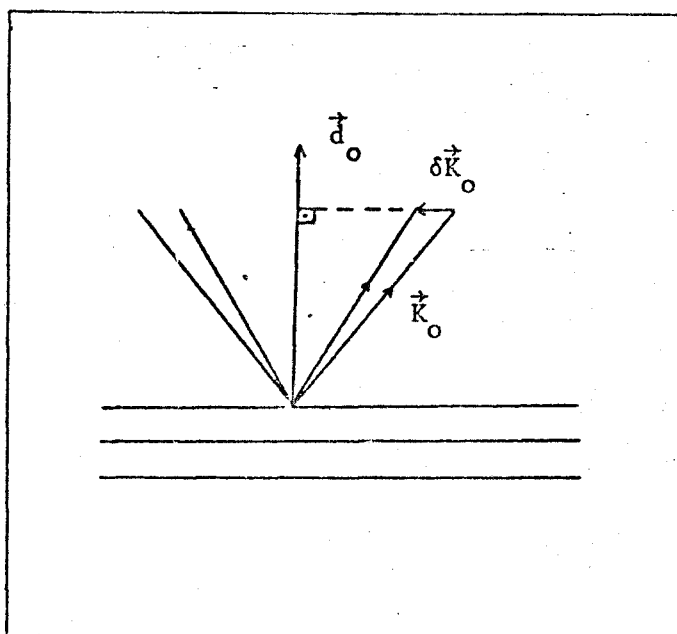


Figura (A.II.1.1)

Da equação (A.II.1.2) verifica-se que $\delta\vec{k}_0$ é normal a \vec{d}_0 , portanto $(\vec{g}-\vec{k}_0)$ é paralelo a \vec{d}_0 . Essa é a condição de focalização para o monocromador, isto é, quando as equações (A.II.1.2) e (A.II.1.7) são satisfeitas simultaneamente.

Se as equações (A.II.1.3) e (A.II.1.4) são derivadas com relação a \vec{k}_1 mantendo-se \vec{k}_0 fixo, um argumento similar leva à conclusão que o analisador estará focalizado quando $(\vec{g}-\vec{k}_1)$ for paralelo a \vec{d}_1 .

O módulo do vetor \vec{g} é calculado da equação (A.II.1.7)

$$\begin{aligned}\vec{g} \cdot \delta\vec{k}_0 - \vec{k}_0 \cdot \delta\vec{k}_0 &= 0 \\ g\delta k_0 \cos A - k_0 \delta k_0 \cos B &= 0 \\ g &= k_0 \frac{\cos B}{\cos A} \quad (\text{A.II.1.8})\end{aligned}$$

onde A e B são os ângulos entre \vec{g} e $\delta\vec{k}_0$, e entre \vec{k}_0 e $\delta\vec{k}_0$, respectivamente; g é o módulo do vetor \vec{g} , k_0 é o módulo do vetor \vec{k}_0 e δk_0 é o módulo do vetor $\delta\vec{k}_0$.

As condições de focalização podem ser representadas graficamente em diagramas. O ponto D é a intersecção de \vec{d}_0 com \vec{d}_1 e o ponto G é o extremo do vetor \vec{g} . As condições de focalização no monocromador e no analisador podem ser satisfeitos simultaneamente somente se G coincide com D.

As figuras (A.II.1.2), (A.II.1.3) e (A.II.1.4) ilustram três diferentes condições de focalização: ótima, boa e péssima, respectivamente, mostrando o diagrama de focalização e o respectivo pico de fonons medido para o cobre⁽⁸⁾ no IPEN.

Podemos então resumir as condições de focalização:

$$\begin{aligned}(\vec{g} - \vec{k}_0) // \vec{d}_0 \\ (\vec{g} - \vec{k}_1) // \vec{d}_1 \\ \delta\vec{k}_0 \perp \vec{d}_0 \\ \vec{g} // \vec{q} \\ \vec{g} \text{ tem o mesmo sentido de } \vec{q}.\end{aligned}$$

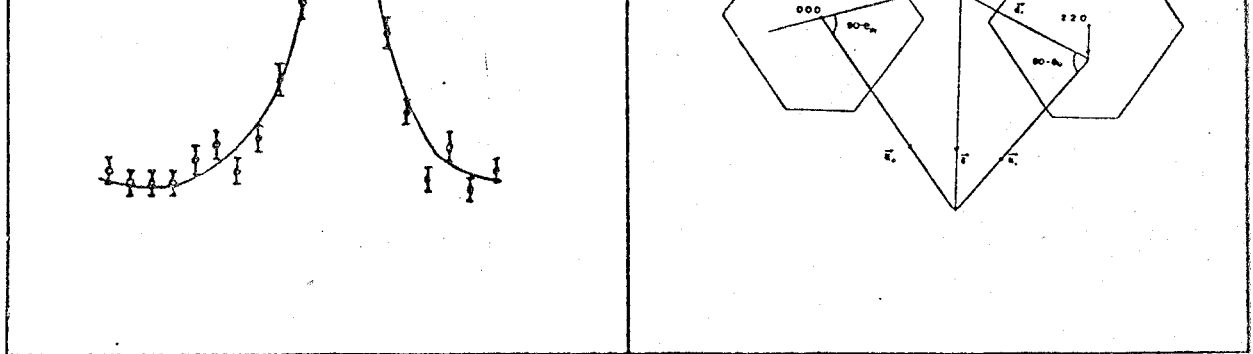


Figura (A.II.1.2) - Ótima Focalização

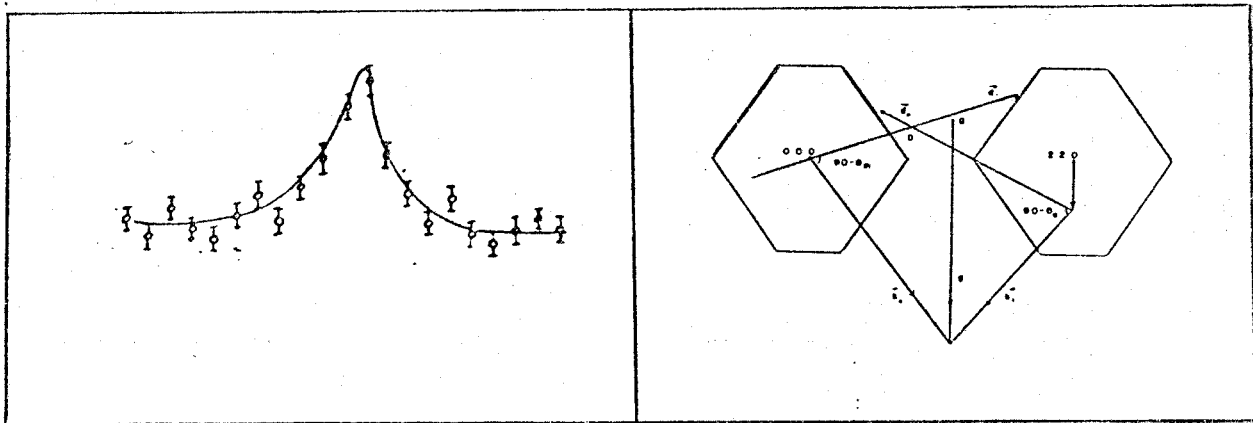


Figura (A.II.1.3) - Boa Focalização

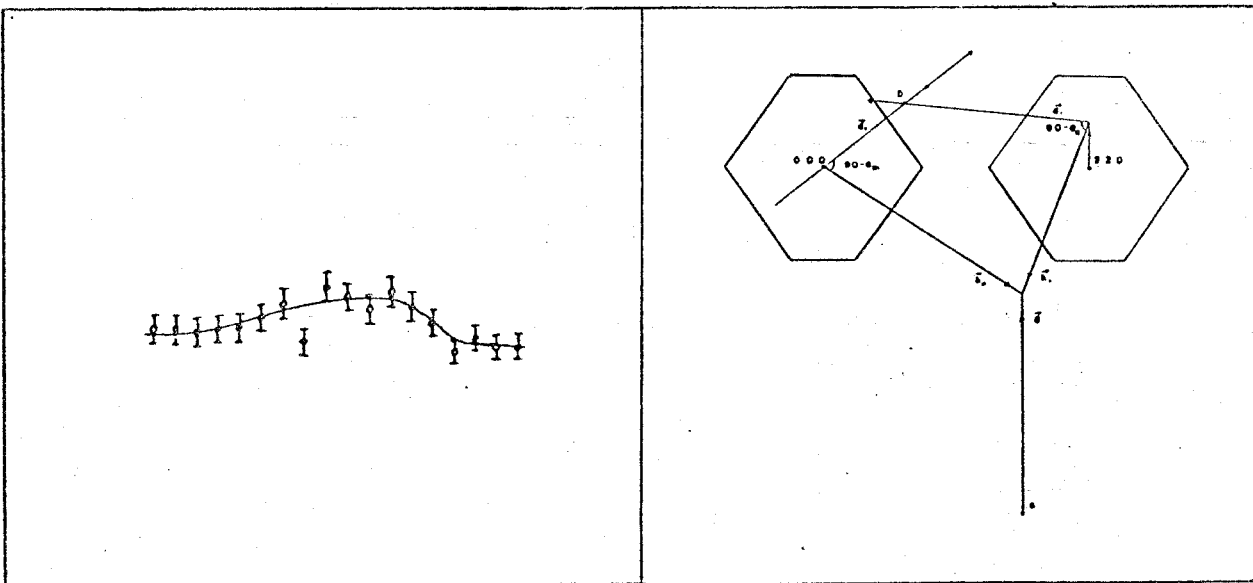


Figura (A.II.1.4) - Péssima Focalização

A.II.2- APLICAÇÃO DAS CONDIÇÕES DE FOCALIZAÇÃO AO ESPECTROMETRO DE TRES EIXOS DO IPEN PARA A MEDIDA DA CURVA DE RELAÇÃO DE DISPERSÃO DO ALUMÍNIO NAS DIREÇÕES $(\xi\xi0)$ E (00ξ)

As figuras (A.II.2.1) e (A.II.2.2) mostram as duas situações possíveis no corte do plano $(1\bar{1}0)$ para o posicionamento do espectrômetro na medida da frequência de um fonon transversal-1 acústico que se propaga na direção $(\xi\xi0)$ juntamente com os respectivos diagramas de focalização.

De acordo com o item A.II.1, nota-se que não é possível obter uma medida experimental do ramo transversal-1, direção $(\xi\xi0)$, com o plano $(1\bar{1}0)$ da amostra paralelo ao plano do espectrômetro, se for utilizado um cristal monocromador de cobre orientado segundo a direção (111) .

Uma tentativa feita para contornar o problema foi mudar a orientação da amostra. A direção de orientação escolhida foi a (100) porque juntamente com a $(1\bar{1}0)$ formam as duas únicas direções de orientação da amostra que possibilita posicionar o espectrômetro para a medida de fonons, utilizando expressões simples como (III.2.6), (III.2.8), (III.2.9) e (III.2.14). Isso se explica pelo fato de ao se deslocar de um ponto a outro nos planos (100) e $(1\bar{1}0)$, é necessário apenas variar dois parâmetros (Q_x e Q_y), enquanto que o terceiro parâmetro (Q_z) é mantido fixo no plano (100) e igual a Q_x no plano $(1\bar{1}0)$.

As construções vetoriais no plano (100) que representam as duas situações possíveis para um fonon transversal acústico que se propaga segundo a direção $(\xi\xi0)$ com vetor de onda reduzido $\xi = 0,3$, são mostradas juntamente com os respectivos diagramas de focalização nas figuras (A.II.2.3) e (A.II.2.4).

Portanto, pela interpretação dos diagramas de focalização das figuras (A.II.2.3) e (A.II.2.4), verifica-se que só é possível a determinação da frequência de um fonon que se propague conforme mostra a construção vetorial (A.II.2.4).

O artifício citado acima, para contornar os problemas de focalização, possibilita a determinação do ramo transversal-1

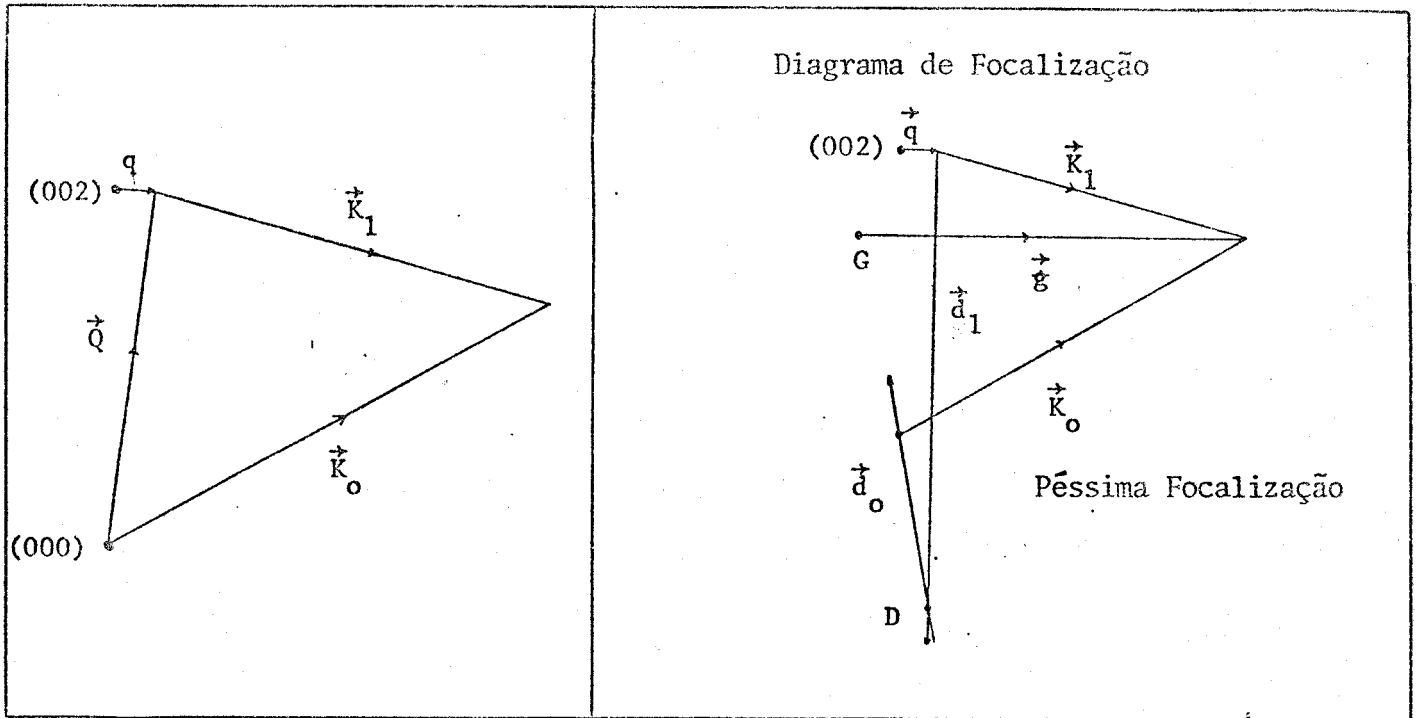


Figura (A.II.2.1)- Fonon na Direção $(\xi\xi 0)T_1$.

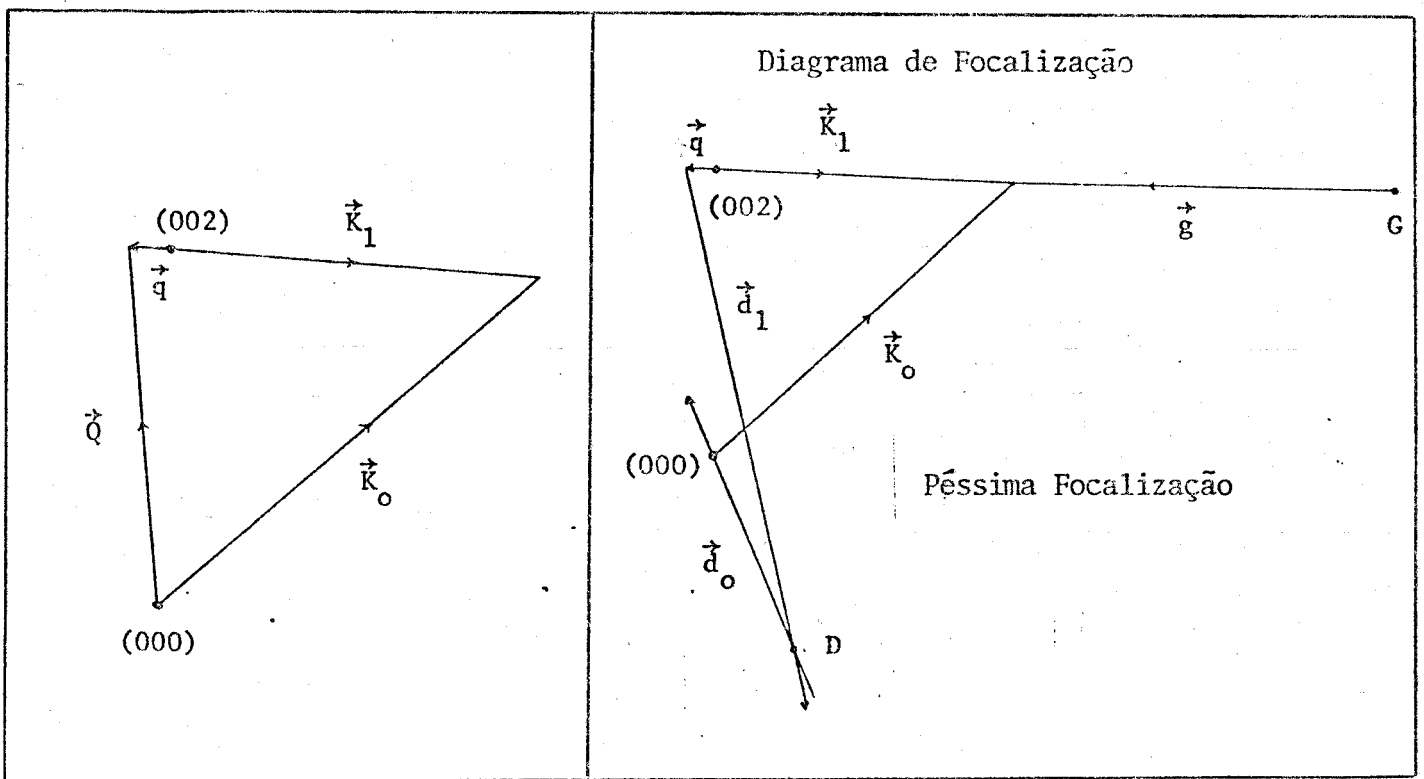


Figura (A.II.2.2)- Fonon na Direção $(\xi\xi 0)T_1$.

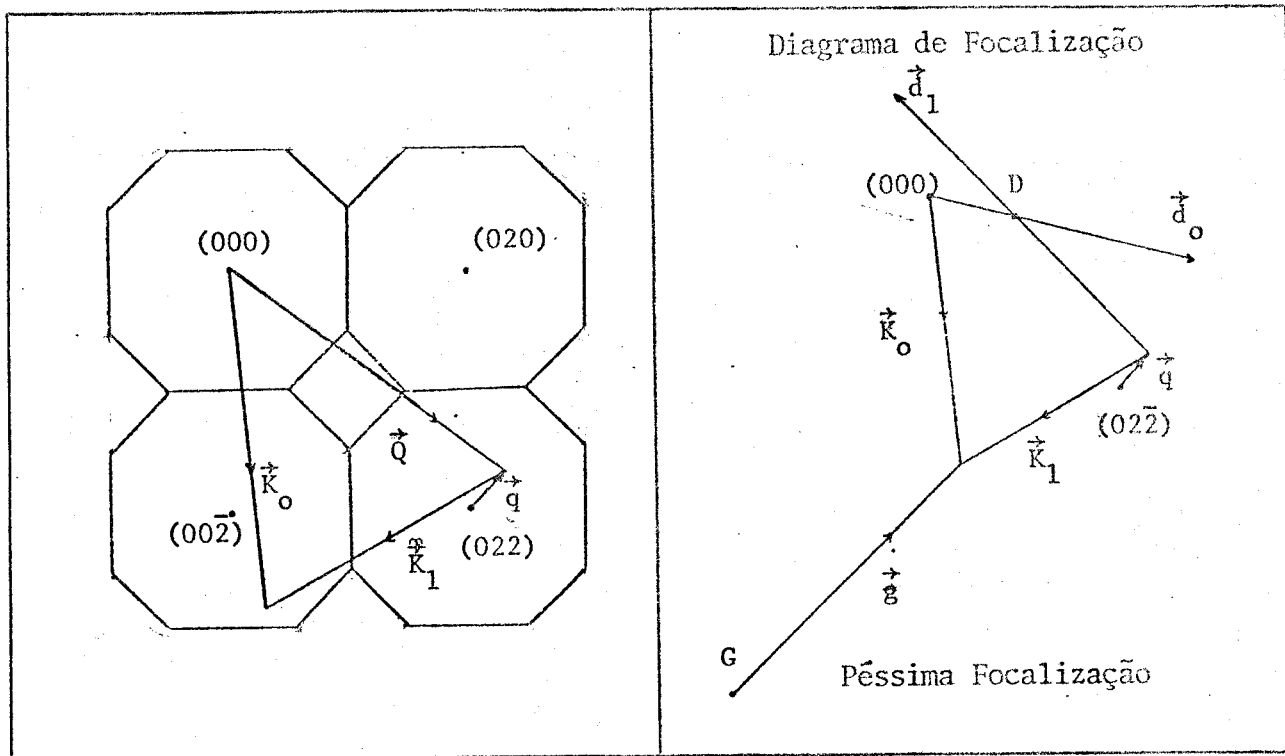


Figura (A.II.2.3)- Fonon na Direção $(\xi\xi 0)T_1$.

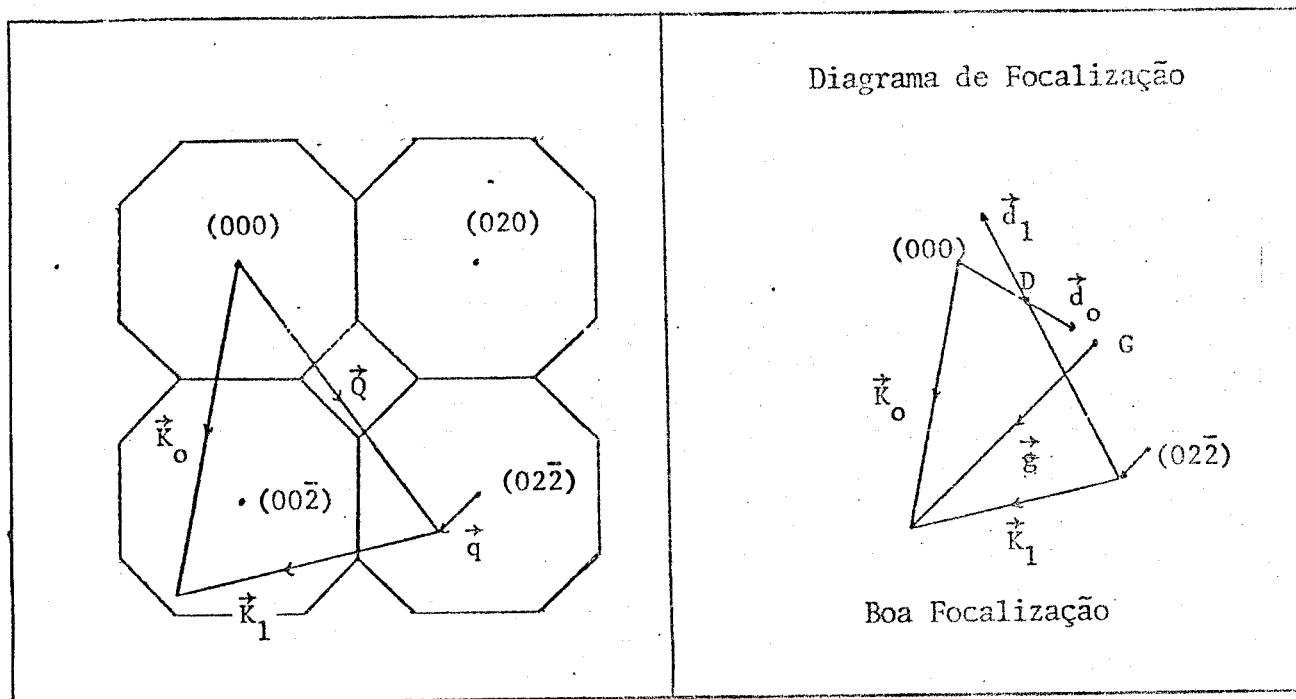


Figura (A.II.2.4)- Fonon na Direção $(\xi\xi 0)T_1$.

acústico mas não para os fonons que se propagam na direção $(\xi\xi0)L$ e $(00\xi)L$. Esses ramos da curva $\omega(\vec{q})$ só poderão ser determinados com uma alteração experimental: uma mudança conveniente na energia dos nêutrons incidentes, ou seja, uma variação no valor de k_0 .

Como já foi citado, o espectrômetro de três eixos do IPEN possui ângulo de monocromatização ($2\theta_m$) fixo, o que representa um valor fixo para a energia dos nêutrons, para um dado cristal monocromador.

Para se efetuar uma mudança na energia dos nêutrons incidentes é necessário mudar os planos de reflexão do cristal monocromador ou utilizar outro cristal.

A relação dos cristais monocromadores disponíveis no IPEN, para uso no espectrômetro de três eixos está apresentada na tabela (A.II.2.1), juntamente com a orientação e o comprimento de onda dos nêutrons espalhados no ângulo fixo $\theta_m = 20,11^\circ$.

A partir da teoria de focalização discutida anteriormente no ítem A.II.1, elaborou-se a tabela (A.II.2.2) que indica como deve ser planejado um experimento para a medida das curvas de dispersão de uma amostra que apresente simetria cúbica de faces centradas, nas direções de simetria (00ξ) e $(\xi\xi0)$, ou seja, o plano da amostra que deve ser paralelo ao plano do espectrômetro e o monocromador que deverá ser utilizado.

Cristal	Planos (hkl)	Distância Interplanar (Å)	Comprimento de Onda (Å)
Al	(2 $\bar{2}$ 0)	1,43	0,978
Al	(020)	2,86	1,956
Al	(111)	2,33	1,594
Ge	(111)	3,26	2,230
Pb	(111)	2,85	1,950
Pb	(220)	1,75	1,197
Cu	(111)	2,08	1,423
Cu	(200)	1,81	1,238
Cu	(220)	1,28	0,874

Tabela (A.II.2.1)

Direção	Modo de Vibração	Plano da Amostra(hkℓ) Paralelo ao Plano do Espectrômetro	Cristal Monocromador e Orientação (hkℓ)
(00ξ)	L	(1 $\bar{1}$ 0)	Cu-(220)
	T	(1 $\bar{1}$ 0)	Cu-(111)
(ξξ0)	L	(100)	Cu-(200)
	T ₁	(100)	Cu-(111)
	T ₂	(1 $\bar{1}$ 0)	Cu-(111)

Tabela (A.II.2.2)

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. ASHCROFT, N.W. & MERMIN, N.D. Solid State Physics. New York, N.Y., John Willey & Sons, Inc., 1975.
2. BORN, M. & HUANG, K. Dynamical Theory of Crystal Lattices. London, Oxford University, 1954.
3. BROCKHOUSE, B.N. Methods for Neutron Spectrometry. In: INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY. Inelastic Scattering of Neutrons in Solids and Liquids: Proceedings of the symposium on... held in Vienna, 11-14 October, 1960. Vienna, 1961 p.113-51 (Proceedings series)
4. DOLLING, G. Neutron Spectrometry and Lattice Dynamics. In: Maradudin, A.A. & Horton, E.K., eds. Dynamical Properties of Solids, V.1: cristalline solids, fundamentals, Amsterdam, North-Holland, 1974, p.541.
5. DOLLING, G. The Theory and Practice of Neutron Inelastic Scattering. In: Califano, S., ed. Lattice Dynamics and Intermolecular Forces: course LV, International School of Physics Enrico Fermi. New York, N.Y., Academic, 1975. p. 175.
6. FUHRMANN, C.; FULFARO, R.; VINHAS, L.A. Desempenho do Espectrômetro de Cristal de 3 Eixos do IEA: Medida das Relações de Dispersão do Cobre. São Paulo, Instituto de Energia Atômica, abril 1978. (IEA-504; COURP-AFN 63).
7. FUHRMANN, C. Projeto e Construção de um Espectrômetro de Cristal de Três Eixos para Nêutrons e Verificação do Desempenho por Meio da Medida das Relações de Dispersão do Cobre. São Paulo, 1979. (Tese de Mestrado, Instituto de Energia Atômica).
8. FULFARO, R.; VINHAS, L.A.; PUGLIESI, R. Focusing Conditions in Neutron Inelastic Scattering Experiments with the IPEN Triple-Axis Spectrometer. São Paulo, Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, outubro 1980. (IPEN 20).

9. HARDY, J.R. Phenomenological Models in Lattice Dynamics. In: Maradudin, A.A. & Hoston, E.K., eds. Dynamical Properties of Solids, V.1: cristalline solids, fundamentals. Amsterdam, North-Holland, 1974. p.1-82.
10. JOOS, G. Theoretical Physics. London, Blachie & Son Ltd., 1959.
11. KITTEL, C. Introduction to Solid State Physics. New York, N.Y., Academic, 1965.
12. KOSTER, G.F. Space Groups and their representations. Solid State Physics, 5: 173-256, 1957.
13. LANGER, J.S. & VOSKO, S.H. J.Phys.Chem.Solids. 12, 1959. p.196.
14. LEHMAN, G.W.; WOLFRAM, T.; DE WAMES, R.E. Axially Symmetric Model for Lattice Dynamics of Metals with Application to Cu, Al and ZrH₂. Phys.Rev., 128, 1962. p.1593.
15. MARADUDIN, A.A. Elements of the theory of lattice dynamics. In: Maradudin, A.A. & Horton, E.K., eds. Dynamical Properties of Solids, V.1: cristalline solids, fundamentals. Amsterdam, North-Holland, 1974. p.1-82.
16. Mc CALLA, T.R. Introduction to Numerical Methods and Fortran Programming. New York, N.Y., John Willey & Sons Inc., 1967.
17. SCHIFF, L.I. Quantum Mechanics. New York, N.Y., McGraw Hill, 1965.
18. SQUIRES, G.L. The Relation Between the Interatomic Forces and the Frequencies of Symmetry Phonons in Cubic Crystals. In: INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY. Inelastic Scattering of Neutrons in Solids and Liquids: proceedings of the symposium on ... held at Chalk River, Canada. 10-14 September, 1962. Vienna, 1963. p.71-86 (Proceedings series).
19. TINKHAM, M. Group Theory and Quantum Mechanics. New York, N.Y., Mc Graw Hill Inc., 1974.

20. YARNELL, J.L.; WARREN, J.L.; KOENING, S.H. Experimental Dispersion Curves for Phonons in Aluminum. In: Wallis, R.F. Lattice Dynamics: Proceedings of the International Conference Held at Copenhagen. Denmark, 5-9 August, 1963. New York, N.Y., Pergamon, 1963 p.247.
21. ZIMAN, J.M. Principles of the Theory of Solids. London, Cambridge University, 1964.