Fisica della Materia Condensata.
Prof. Paola Gallo.
Esonero - 14 Novembre 2024

1 Esercizio 1

Un cristallo triatomico di struttura fcc e parametro reticolare $a = 0.54$nm viene studiato con il metodo delle polveri ($\lambda = 0.15\,\mathring{A}$). Un atomo ha fattore di forma f_A, gli altri due atomi hanno fattore di forma f_B. I tre atomi sono individuati dai vettori di base $\vec{d}_A = \vec{0}$, $\vec{d}_{B_1} = \frac{a}{4}(1,1,1)$ e $\vec{d}_{B_2} = \frac{3a}{4}(1,1,1)$.

1. Studiare il fattore di struttura del cristallo. (5 punti)
2. Determinare la famiglia di piani a cui corrisponde il primo picco di diffrazione nel sistema di riferimento del reticolo sc. (5 punti)
3. Determinare il fattore di forma se $f_B = f_A/2$ e l'angolo a cui si trova il primo picco di riflessione. (5 punti)

2 Esercizio 2

Un solido monoatomico ha reticolo bcc con lato della cella cubica $a = 3\,\mathring{A}$ e densità è $\rho = 2.8 g/cm^3$. Le relazioni di dispersioni dei modi acustici longitudinali e trasversali siano

$$\omega_L(q) = \omega_{0L} \sin\left(\frac{q\,a}{2}\right),$$
$$\omega_T(q) = \omega_{0T} \sin\left(\frac{q\,a}{2}\right),$$

con $\omega_{0L} = 0.73 \cdot 10^{13} rad/s$ e $\omega_{0T} = 0.23 \cdot 10^{13} rad/s$.

1. Determinare le costanti elastiche dei modi acustici. (5 punti)
2. Determinare le velocità del suono. (5 punti)
3. Calcolare la capacità termica del solido per unità di massa a $T = 5\,\mathrm{K}$ e a $T = 1000\,\mathrm{K}$. (5 punti)

3 Soluzioni

3.1 Esercizio 1

1. Il cristallo è un fcc, il reticolo reciproco di un reticolo fcc è un bcc, e i vettori primitivi di reticolo reciproco sono:

$$\vec{g}_1 = \frac{2\,\pi}{a}(-1,1,1)$$
$$\vec{g}_2 = \frac{2\,\pi}{a}(1,-1,1)$$
$$\vec{g}_3 = \frac{2\,\pi}{a}(1,1,-1)$$

   Poichè la base è costituita da tre atomi occorre studiare le eventuali estinzioni che corrispondono a valori nulli del fattore di struttura del cristallo. Il fattore di struttura è definito come

$$F(\vec{G}) = N \sum_i f_i(\vec{G}) \exp\left(-i\,\vec{G}\cdot\vec{d}_i\right)$$

   con $\vec{G} = h\,\vec{g}_1 + k\,\vec{g}_2 + l\,\vec{g}_3$ generico vettore del reticolo reciproco e $\vec{d}_i$ i vettori $\vec{d}_A$, $\vec{d}_{B1}$ e $\vec{d}_{B2}$ degli atomi di cui è costituita la base.

   Dati i vettori di reticolo reciproco del cristallo fcc, il generico vettore di reticolo reciproco del cristallo è $\vec{G} = \frac{2\,\pi}{a}(-h+k+l, h-k+l, h+k-l)$.

   da cui otteniamo

$$\vec{G}\cdot\vec{d}_A = 0,$$
$$\vec{G}\cdot\vec{d}_{B1} = \frac{\pi}{2}(h+k+l),$$
$$\vec{G}\cdot\vec{d}_{B2} = \frac{3\pi}{2}(h+k+l).$$

   Pertanto il fattore di struttura è:

$$F(\vec{G}) = N\left[f_A + f_B\,e^{i\frac{\pi}{2}\,(h+k+l)} + f_B\,e^{-i\frac{\pi}{2}\,(h+k+l)}\right] = $$
$$= N\left\{f_A + 2f_B\cos\left[\frac{\pi}{2}(h+k+l)\right]\right\}.$$

   Di conseguenza

$$F(\vec{G}) = \begin{cases} N(f_A+2f_B), & \text{se } \frac{\pi}{2}(h+k+l) = 2n\pi \to h+k+l = 4n, \\ Nf_A, & \text{se } \frac{\pi}{2}(h+k+l) = \frac{\pi}{2}+n\pi \to h+k+l = 2n+1, \\ N(f_A-2f_B), & \text{se } \frac{\pi}{2}(h+k+l) = \pi+2n\pi \to h+k+l = 2(2n+1). \end{cases}$$

   Pertanto tutte le riflessioni sono permesse a meno di particolari relazioni tra i fattori di forma.

2. Se tutte le riflessioni sono permesse allora il primo angolo di diffrazione corrisponde al vettore di reticolo reciproco piu corto che punta al centro del cubo:

$$\vec{G}_1 = \frac{2\,\pi}{a}(1,1,1) = \vec{g}_1 + \vec{g}_2 + \vec{g}_3.$$

   Dal momento che i vettori primitivi di un reticolo reciproco sc sono:

$$\begin{aligned} \vec{g}_{1,sc} &= \frac{2\,\pi}{a}(1,0,0) \\ \vec{g}_{2,sc} &= \frac{2\,\pi}{a}(0,1,0) \\ \vec{g}_{3,sc} &= \frac{2\,\pi}{a}(0,0,1) \end{aligned}$$

   allora $\vec{G}_1$ può anche essere scritto:

$$\vec{G}_1 = \frac{2\,\pi}{a}(1,1,1) = \vec{g}_{1,sc} + \vec{g}_{2,sc} + \vec{g}_{3,sc}$$

   e dunque corrisponde alla famiglia di piani (111) nel simple cubic.

3. Se $f_B = f_A/2$ il fattore di struttura è:

$$\begin{aligned} F(\vec{G}) &= N\left\{f_A + 2f_B\cos\left[\frac{\pi}{2}(h+k+l)\right]\right\} = \\ &= f_A N\left\{1 + \cos\left[\frac{\pi}{2}(h+k+l)\right]\right\}. \end{aligned}$$

   Di conseguenza

$$F(\vec{G}) = \begin{cases} 2Nf_A, & \text{se } \frac{\pi}{2}(h+k+l) = 2n\pi \to h+k+l = 4n, \\ Nf_A, & \text{se } \frac{\pi}{2}(h+k+l) = \frac{\pi}{2} + n\pi \to h+k+l = 2n+1, \\ 0, & \text{se } \frac{\pi}{2}(h+k+l) = \pi + 2n\pi \to h+k+l = 2(2n+1). \end{cases}$$

   Come si può vedere, alcune delle riflessioni non sono permesse.

   Gli indici del piu corto dei vettori di reticolo reciproco nel reticolo dato sono (1,1,1), se li sostituiamo nel fattore di struttura vediamo che questo è non nullo:

$$F(\vec{G_1}) = N\,f(1 + \exp\,(-i\,\frac{\pi}{2}3)) = N\,f(i+1).$$

Quindi il primo picco è associato al vettore $\vec{G}_1$ di modulo

$$|\vec{G}_1| = \frac{2\,\pi}{a}\sqrt{3}.$$

Dalla formula per la condizione di interferenza costruttiva

$$|\vec{G}| = \frac{4\pi}{\lambda}\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)$$

si ottiene

$$\theta = 2.8^\circ.$$

3.2 Esercizio 2

1. Per le branche acustiche possiamo scrivere:

$$\omega_{0L} = 2\sqrt{\frac{C_L}{M}}, \omega_{0T} = 2\sqrt{\frac{C_T}{M}}.$$

Invertendo tali relazioni si ottiene

$$C_L = \frac{\omega_{0L}^2\,M}{4}, C_T = \frac{\omega_{0T}^2\,M}{4},$$

dove

$$M = \frac{a^3\,\rho}{2} = 38\cdot 10^{-24}\,\mathrm{g},$$

da cui ricaviamo il valore delle costanti di forza:
$C_L = 503\,\mathrm{dyne/cm}$, $C_T = 50\,\mathrm{dyne/cm}$.

2. La velocità del suono è data da

$$v_s = \lim_{q\to 0}\frac{d\,\omega(q)}{d\,q}.$$

Si avrà per le due branche

$$v_s^L = \lim_{q\to 0}\,\omega_{0L}\frac{a}{2}\cos\left(\frac{q\,a}{2}\right) = 10.95\times 10^4\,\mathrm{cm/s},$$
$$v_s^T = \lim_{q\to 0}\,\omega_{0T}\left[\frac{a}{2}\cos\left(\frac{q\,a}{2}\right)\right] = 3.45\times 10^4\,\mathrm{cm/s}.$$

3. Per calcolare la capacità termica dobbiamo prima trovare le temperature di Debye $\Theta_D^{L,T}$. Per un reticolo tridimensionale *bcc* si ha che il vettore d'onda di Debye è

$$q_D = \frac{\sqrt[3]{12\,\pi^2}}{a} = 1.64\times 10^8\,\mathrm{cm}^{-1}$$

e le temperature di Debye sono

$$\Theta_D^L = \frac{\hbar}{K_B}\,\omega_D^L = \frac{\hbar}{K_B}\,v_s^L\,q_D = 136\,\mathrm{K},$$
$$\Theta_D^T = \frac{\hbar}{K_B}\,\omega_D^T = \frac{\hbar}{K_B}\,v_s^T\,q_D = 43\,\mathrm{K}.$$

Entrambe le temperature di Debye sono maggiori di T, si può quindi usare l'approssimazione di Debye. Ci sono tre branche acustiche, una longitudinale e due trasverse, di conseguenza la capacità termica per unità di massa è:

$$c_v(T) = \frac{C_v(T)}{M} = \frac{4}{5}\,\pi^4\,\frac{2}{\rho\,a^3}\,K_B\,T^3\left[\frac{1}{(\Theta_D^L)^3} + \frac{2}{(\Theta_D^T)^3}\right],$$

che a $T = 5\,\mathrm{K}$ vale

$$c_v(5\,\mathrm{K}) = 0.09\,\mathrm{J}K^{-1}g^{-1}.$$

Ad alte temperature ci troviamo nel limite classico (Dulong-Petit). Tutte e tre le branche acustiche contribuiscono allo stesso modo

$$c_v = 6\,\frac{1}{\rho\,a^3}\,K_B = 1.08\,\mathrm{J}K^{-1}g^{-1}.$$