

# Fisica della Materia Condensata

Prof. Paola Gallo

## I prova di esonero - 2 Dicembre 2016

Testo e Soluzioni

### Esercizio 1

Col metodo delle polveri viene studiato un cristallo monoatomico.

1. Calcolare il modulo dei due vettori di reticolo reciproco ai quali sono associati i primi due massimi di diffrazione,  $\theta^{(1)}$  e  $\theta^{(2)}$ , nei due seguenti reticoli A e B:

**A:** reticolo cubico semplice (*sc*) con base atomica  $\vec{d}_1 = (0, 0, 0)$  e  $\vec{d}_2 = \frac{a}{2}(1, 1, 1)$ ,

**B:** reticolo cubico a corpo centrato (*bcc*) con base atomica  $\vec{d}_1 = (0, 0, 0)$  e  $\vec{d}_2 = \frac{a}{4}(1, 1, 1)$ .

2. Determinare se il campione studiato ha reticolo di tipo A o di tipo B, dove A e B sono i reticoli descritti nel punto precedente, sapendo che i primi due angoli ai quali si osserva sperimentalmente un massimo di diffrazione valgono  $\theta^{(1)} = 35.7^\circ$  e  $\theta^{(2)} = 41.5^\circ$ .
3. Calcolare il parametro reticolare  $a$  del campione, sapendo che la lunghezza d'onda usata nell'esperimento vale  $\lambda = 1.1 \text{ \AA}$ .
4. Come cambierebbe la posizione del primo massimo di diffrazione se il campione fosse un cristallo biatomico?

### Soluzione

1)

Prima struttura: *sc* con base atomica  $\vec{d}_1 = (000)$  e  $\vec{d}_2 = \frac{a}{2}(1, 1, 1)$

Questo reticolo corrisponde ad un reticolo diretto *bcc* semplice (cioè con base atomica costituita da un solo atomo in  $\vec{d}_1 = (0, 0, 0)$ ) quando viene descritto con i vettori primitivi di traslazione di un *sc*. I vettori  $\vec{G}_i^*$  cercati corrispondono sicuramente ai due vettori di reticolo reciproco più corti di un *bcc*, perchè, descrivendo un *bcc* con la sua base primitiva, sappiamo che il fattore di struttura è sempre diverso da zero in quanto la base atomica è costituita da un solo atomo,  $f_1 = f_2$ . I vettori cercati sono:

$$\vec{G}_1^* = \frac{4\pi}{a} \left( \frac{\hat{x}}{2} + \frac{\hat{y}}{2} \right) = \vec{g}_3 = (001) \quad \text{centro di una delle tre facce adiacenti all'origine}$$

$$\vec{G}_2^* = \frac{4\pi}{a} \hat{x} = -\vec{g}_1 + \vec{g}_2 + \vec{g}_3 = (-111) \quad \text{lato del cubo}$$

I primi due massimi di diffrazione corrispondono a questi vettori, i cui moduli sono:

$$\begin{aligned}\theta^{(1)} &\rightarrow G_1^* = \frac{2\pi}{a}\sqrt{2} \\ \theta^{(2)} &\rightarrow G_2^* = \frac{4\pi}{a}\end{aligned}\tag{1}$$

**Per chi non si fosse accorto che il reticolo A è un bcc semplice.**

Il generico vettore del reticolo reciproco di un *sc* è:

$$\vec{G} = \frac{2\pi}{a}(h, k, l)$$

Il fattore di struttura del cristallo monoatomico ( $f_1 = f_2 = f$ ) è:

$$F(\vec{G}) = N \sum_i f_i e^{-i\vec{G}\cdot\vec{d}_i} = Nf \left(1 + e^{-i\pi(h+k+l)}\right)$$

Per l'*sc* i vettori di reticolo reciproco più corti sono (vedi Es.4 della raccolta sulla diffrazione):

$\vec{G}_1 = \vec{g}_1 = (100)$	<i>lato del cubo</i>
$\vec{G}_2 = \vec{g}_1 + \vec{g}_2 = (110)$	<i>diagonale della faccia</i>
$\vec{G}_3 = \vec{g}_1 + \vec{g}_2 + \vec{g}_3 = (111)$	<i>diagonale del cubo</i>
$\vec{G}_4 = 2\vec{g}_1 = (200)$	<i>2 · lato del cubo</i>

Controlliamo le estinzioni:

$$\begin{aligned}F(G_1) &= Nf \left(1 + e^{-i\pi(1)}\right) = 0 \\ F(G_2) &= Nf \left(1 + e^{-i\pi(2)}\right) = 2Nf \\ F(G_3) &= Nf \left(1 + e^{-i\pi(3)}\right) = 0 \\ F(G_4) &= Nf \left(1 + e^{-i\pi(2)}\right) = 2Nf\end{aligned}$$

Per cui i vettori associati ai primi due massimi di diffrazione sono  $\vec{G}_2$  e  $\vec{G}_4$  i cui moduli sono:

$$\begin{aligned}\theta^{(1)} &\rightarrow G_2 = \frac{2\pi}{a}\sqrt{2} \\ \theta^{(2)} &\rightarrow G_4 = \frac{4\pi}{a}\end{aligned}\tag{2}$$

Come vedete, si ha che  $|\vec{G}_1^*| = |\vec{G}_2|$  e  $|\vec{G}_2^*| = |\vec{G}_4|$ , dove  $\vec{G}_1^*, \vec{G}_2^*$  sono i vettori in Eq.(1).

Seconda struttura: *bcc* con base atomica  $\vec{d}_1 = (0, 0, 0)$  e  $\vec{d}_2 = \frac{a}{4}(1, 1, 1)$

Il generico vettore del reticolo reciproco di un *bcc* è (vedi esercizio 3 della raccolta sulla

diffrazione):

$$\vec{G} = \frac{2\pi}{a}(k+l, h+l, h+k)$$

$$\vec{G} \cdot \vec{d}_2 = \frac{2\pi}{a}(k+l, h+l, h+k) \cdot \frac{a}{4}(111) = \frac{\pi}{2}(k+l+h+l+h+k) = \pi(h+k+l)$$

e il fattore di struttura del cristallo monoatomico ( $f_1 = f_2 = f$ ) è:

$$F(\vec{G}) = N \sum_i f_i e^{-i\vec{G} \cdot \vec{d}_i} = Nf \left(1 + e^{-i\pi(h+k+l)}\right)$$

Per il *bcc* i vettori di reticolo reciproco più corti sono (vedi Es.4 della raccolta sulla diffrazione):

$$\begin{aligned} \vec{G}_1 &= \frac{4\pi}{a}\left(\frac{\hat{x}}{2} + \frac{\hat{y}}{2}\right) = \vec{g}_3 = (001) && \text{centro di una delle tre facce adiacenti all'origine} \\ \vec{G}_2 &= \frac{4\pi}{a}\hat{x} = -\vec{g}_1 + \vec{g}_2 + \vec{g}_3 = (-111) && \text{lato del cubo} \\ \vec{G}_3 &= \frac{4\pi}{a}\left(\hat{x} + \frac{\hat{y}}{2} + \frac{\hat{z}}{2}\right) = \vec{g}_2 + \vec{g}_3 = (011) && \text{centro di una delle tre facce non adiacenti all'origine} \\ \vec{G}_4 &= \frac{4\pi}{a}(\hat{x} + \hat{y}) = 2\vec{g}_3 = (002) && \text{diagonale della faccia} \end{aligned}$$

Controlliamo le estinzioni:

$$F(G_1) = Nf \left(1 + e^{-i\pi(1)}\right) = 0$$

$$F(G_2) = Nf \left(1 + e^{-i\pi(1)}\right) = 0$$

$$F(G_3) = Nf \left(1 + e^{-i\pi(2)}\right) = 2Nf$$

$$F(G_4) = Nf \left(1 + e^{-i\pi(2)}\right) = 2Nf$$

Per cui i vettori associati ai primi due massimi di diffrazione sono  $\vec{G}_3$  e  $\vec{G}_4$  e i loro moduli valgono:

$$\theta^{(1)} \rightarrow G_3 = \frac{2\pi}{a}\sqrt{6}$$

$$\theta^{(2)} \rightarrow G_4 = \frac{4\pi}{a}\sqrt{2}$$

**2)**

Prima struttura: *sc* con base atomica  $\vec{d}_1 = (000)$  e  $\vec{d}_2 = \frac{a}{2}(1, 1, 1)$

$$\frac{G^{(2)}}{G^{(1)}} = \frac{G_4}{G_2} = \sqrt{2} = 1.41$$

Seconda struttura: *bcc* con base atomica  $\vec{d}_1 = (0, 0, 0)$  e  $\vec{d}_2 = \frac{a}{4}(1, 1, 1)$

$$\frac{G^{(2)}}{G^{(1)}} = \frac{G_4}{G_3} = \frac{2}{\sqrt{3}} = 1.15$$

Esperimento:  $G^{(i)} = \frac{4\pi}{\lambda} \sin(\theta^{(i)}/2)$

$$\frac{G^{(2)}}{G^{(1)}} = \frac{\sin(\theta^{(2)}/2)}{\sin(\theta^{(1)}/2)} = \frac{\sin(41.5^\circ/2)}{\sin(35.7^\circ/2)} = 1.16$$

Per confronto, il campione studiato ha la struttura di tipo B, cioè un reticolo *bcc* con base atomica  $\vec{d}_1 = (0, 0, 0)$  e  $\vec{d}_2 = \frac{a}{4}(1, 1, 1)$ .

**3)**

Il parametro reticolare si trova considerando il modulo di uno dei due vettori  $G^{(1)}$  o  $G^{(2)}$ :

$$G^{(1)} = G_3 = \frac{2\pi}{a}\sqrt{6} = \frac{4\pi}{\lambda} \sin(\theta^{(1)}/2)$$

$$a = \frac{\sqrt{6} \lambda}{2 \sin(\theta^{(1)}/2)} = \frac{\sqrt{6} 1.1 \text{ \AA}}{2 \sin(35.7^\circ/2)} = 4.4 \text{ \AA}$$

**4)**

Se il cristallo fosse biatomico,  $f_1 \neq f_2$  e di conseguenza il fattore di struttura sarebbe sempre diverso da zero:

$$F(\vec{G}) = N \sum_i f_i e^{-i\vec{G} \cdot \vec{d}_i} = N \left( f_1 + f_2 e^{-i\pi(h+k+l)} \right) \neq 0$$

Questo equivale a dire che *ordinatamente* a tutti i vettori  $G_i$  corrisponde un massimo di diffrazione. Il primo massimo si ha per il vettore più corto:

$$\theta^{(1)} \rightarrow G^{(1)} = G_1 = \frac{2\pi}{a}\sqrt{2}$$

Ed il nuovo angolo vale:

$$G_2 = \frac{2\pi}{a}\sqrt{2} = \frac{4\pi}{\lambda} \sin(\theta^{(1)}/2) \quad \rightarrow \quad \theta^{(1)} = 2 \arcsin\left(\frac{\lambda}{a\sqrt{2}}\right) = 20.4^\circ$$

## Esercizio 2

Un certo elemento di densità  $7310 \text{ kg/m}^3$  cristallizza in un reticolo di simmetria cubica semplice. Sia  $a = 4 \text{ \AA}$  il lato della cella cubica. Le relazioni di dispersione delle branche acustiche sono:

$$\begin{aligned}\omega_L(q) &= \omega_0 \left| \sin\left(\frac{qa}{2}\right) \right| \\ \omega_{T1}(q) &= \omega_0 \left| \sin(qa) + \sin\left(\frac{qa}{2}\right) \right| \\ \omega_{T2}(q) &= \omega_0 \left| \sin(qa) - \sin\left(\frac{qa}{2}\right) \right|\end{aligned}$$

dove L indica la branca longitudinale, T1 e T2 quelle trasversali. La frequenza longitudinale a bordo zona vale  $1 \cdot 10^{13} \text{ rad/s}$ .

1. Calcolare le velocità del suono del cristallo;
2. Calcolare le temperature di Debye del cristallo;
3. Calcolare la capacità termica per unità di massa in approssimazione di Debye a  $T = 10 \text{ K}$ ;
4. Calcolare la capacità termica per unità di massa a  $T = 1000 \text{ K}$ ;
5. Quanto vale la capacità termica per unità di massa a  $T = 1000 \text{ K}$  nel caso il cristallo abbia tre atomi per cella primitiva?

## Soluzione

1)

La velocità del suono si ricava dal limite per  $q \rightarrow 0$  della derivata rispetto a  $q$  della branca acustica. Questo cristallo ha tre branche acustiche non degeneri a cui, in principio, corrispondono tre differenti velocità del suono:

$$\begin{aligned}v_L &= \left( \frac{d\omega_L(q)}{dq} \right)_{q=0} = \left( \frac{a}{2} \omega_0 \cos\left(\frac{qa}{2}\right) \right)_{q=0} = \frac{a}{2} \omega_0 \\ v_{T1} &= \left( \frac{d\omega_{T1}(q)}{dq} \right)_{q=0} = \omega_0 \left( a \cos(qa) + \frac{a}{2} \cos\left(\frac{qa}{2}\right) \right)_{q=0} = \frac{3a}{2} \omega_0 = 3v_L \\ v_{T2} &= \left( \frac{d\omega_{T2}(q)}{dq} \right)_{q=0} = \omega_0 \left( a \cos(qa) - \frac{a}{2} \cos\left(\frac{qa}{2}\right) \right)_{q=0} = \frac{a}{2} \omega_0 = v_L\end{aligned}$$

Dal valore della frequenza longitudinale a bordo zona si ricava il valore della costante  $\omega_0$ :

$$\omega_L(\pi/a) = \omega_0 \left| \sin\left(\frac{\pi}{2}\right) \right| = \omega_0 = 1 \cdot 10^{13} \text{ rad/s}$$

Le velocità del suono risultano dunque:

$$v_L = 2 \cdot 10^{-10} \text{ m} \cdot 1 \cdot 10^{13} \text{ rad/s} = 2000 \text{ m/s}$$

$$v_{T1} = 6000 \text{ m/s}$$

$$v_{T2} = 2000 \text{ m/s}$$

**2)**

La temperatura di Debye dipende dal valore della velocità del suono. Il vettore d'onda di Debye,  $q_D$ , per il reticolo in esame vale:

$$q_D = \sqrt[3]{6\pi^2 n} = \sqrt[3]{6\pi^2}/a = 0.97 \text{ \AA}^{-1}$$

e le temperature di Debye sono:

$$\Theta_L = \frac{\hbar}{k_B} v_L q_D = \frac{6.583 \cdot 10^{-16} \text{ eV s}}{8.62 \cdot 10^{-5} \text{ eV/K}} \cdot 2000 \text{ m/s} \cdot 0.97 \text{ \AA}^{-1} = 148 \text{ K}$$

$$\Theta_{T1} = \frac{\hbar}{k_B} v_{T1} q_D = 3\Theta_L = 445 \text{ K}$$

$$\Theta_{T2} = \frac{\hbar}{k_B} v_{T2} q_D = \Theta_L = 148 \text{ K}$$

**3)**

A  $T = 10 \text{ K}$  vale l'approssimazione di Debye sia per la branca longitudinale che per le due trasversali. L'  $i$ -sima branca apporterà alla capacità termica per unità di massa totale un contributo:

$$c_m^i(T) = \frac{4}{5}\pi^4 \left(\frac{T}{\Theta_i}\right)^3 \frac{N}{M} k_B = \frac{4}{5}\pi^4 \left(\frac{T}{\Theta_i}\right)^3 \frac{n}{\rho} k_B$$

La capacità termica per unità di massa totale è dunque:

$$\begin{aligned} c_m(T) &= \sum_i c_m^i(T) = \frac{4}{5}\pi^4 \frac{n}{\rho} k_B T^3 \left( \frac{1}{\Theta_L^3} + \frac{1}{\Theta_{T1}^3} + \frac{1}{\Theta_{T2}^3} \right) = \\ &= \frac{220}{135}\pi^4 \frac{n}{\rho} k_B \left( \frac{T}{\Theta_L} \right)^3 \end{aligned}$$

$$c_m(10 \text{ K}) = 1.5 \text{ J/(K kg)}$$

**4)**

$T = 1000 \text{ K} \gg \Theta_i$ , per cui vale l'approssimazione classica di Dulong-Petit per 3N gradi di libertà:

$$c_m(1000 \text{ K}) = 3 \frac{N}{M} k_B = 3 \frac{n}{\rho} k_B = 88.5 \text{ J/(K kg)}$$

**3)**

Con una base atomica formata da 3 atomi ( $\nu_b = 3$ ), i modi normali totali sono  $9N$ , dunque nel limite classico:

$$c'_m(1000 \text{ K}) = 9 \frac{N}{M} k_B = 3 c_m(1000 \text{ K}) = 265.5 \text{ J}/(\text{K kg})$$