Fononi e calori reticolari – Esercizi con soluzioni

Fisica della Materia Condensata

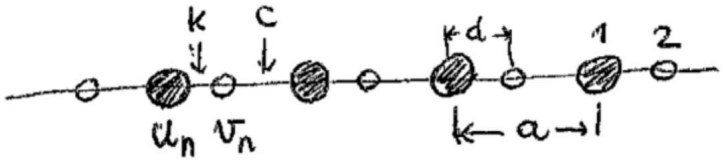
Dipartimento di Matematica e Fisica

Università degli Studi Roma Tre

Fononi e calori reticolari

Esercizio 1

Si consideri una catena lineare biatomica. Calcolare le relazioni di dispersione per le bande fononiche $\omega = \omega(q)$ nel caso i due atomi 1 e 2 abbiano la stessa massa $M_1 = M_2 = M$, ma le costanti di forza C e K tra gli atomi primi vicini dipendano dal fatto che la loro separazione sia d o $(a-d)$, dove a è il passo della catena (vedi disegno). Discutere i casi limite dei fononi di centro zona ($q = 0$) e bordo zona ($q = \frac{\pi}{a}$).



Esercizio 2

In una catena lineare di passo $a = 2.5$ Å, la velocità del suono per un'onda longitudinale è 10^5 cm/s. Calcolare:

1. la pulsazione di un'onda sonora di lunghezza d'onda $\lambda = 20$ Å;
2. la temperatura di Debye della catena;
3. il contributo del modo di cui sopra all'energia interna per unità di lunghezza della catena a T=600 K.

Esercizio 3

Gli atomi di una catena lineare monoatomica (M=16 uma) disposta lungo l'asse $\hat{x}$, possono muoversi nel piano xy sotto l'effetto di un potenziale elastico del tipo:

$$V = \frac{1}{2}\sum_n \left[\alpha\left(u_x^n - u_x^{n+1}\right)^2 + \beta\left(u_y^n - u_y^{n+1}\right)^2\right]$$

dove $\alpha = 3\beta = 1.66 \cdot 10^4$ dyne/cm ed n è l'indice che scorre sugli atomi della catena.

1. Determinare le relazioni di dispersione dei modi della catena lineare per le diverse polarizzazioni.

2. Calcolare per ogni modo la frequenza di vibrazione a centro e bordo zona.

Esercizio 4

Un cristallo con reticolo cubico semplice ha parametro reticolare $a = 1.5$ Å ed una temperatura di Debye $\Theta_D = 150$ K.

1. Calcolare la capacità termica reticolare per unità di volume c_V a T = 30 K e a T = 700 K.

2. Ricalcolare il punto 1 nel caso il cristallo abbia due atomi per cella cubica.

Esercizio 5

Lo stagno cristallizza in una struttura FCC con parametro reticolare di cella, misurato a T = 0 K, $a_0 = 6.384$ Å. E' noto che la temperatura di Debye dello stagno è $\Theta_D = 260$ K e che il parametro reticolare si espande secondo la legge $a(T) = a_0(1 + \alpha T)$ che si assume valere fino a 1000 K.

1. Calcolare il coefficiente di dilatazione α sapendo che la velocità del suono nello stagno è $v_s = 3527$ m/s a T = 150 K.

2. Calcolare la capacità termica reticolare per unità di volume a T = 50 K e T = 500 K.

Esercizio 6

Una catena lineare biatomica è disposta lungo l'asse $\hat{x}$ ed ha passo reticolare $a = 3$ Å. Sapendo che nella cella primitiva gli atomi sono indivituati dai due vettori $\vec{d_1} = \vec{0}$ e $\vec{d_2} = \frac{a}{3}\hat{x}$, che gli atomi hanno massa uguale (M = 21 uma) e che le costanti di forza valgono $\beta = 5$ Nm^{-1} quando la separazione tra due atomi primi vicini vale $a/3$ e $\gamma = 1$ Nm^{-1} quando vale $2a/3$,

1. Trovare i moti ionici a $q > 0$.

2. Determinare la velocità del suono v_s, il vettore d'onda di Debye k_D e la temperatura di Debye Θ_D.

Esercizio 7

Un cristallo ha struttura cubica semplice con parametro reticolare $a = 4$ Å. Sapendo che le leggi di dispersione per fononi acustici e ottici sono date da:

$$\hbar\omega_{ac} = 8 \cdot 10^{-3} \sin\left(\frac{ka}{2}\right) \text{ eV}$$
$$\hbar\omega_{ot} = 7.5 \cdot 10^{-2} \text{ eV}$$

1. Determinare la velocità del suono v_s, il vettore d'onda di Debye k_D e la temperatura di Debye Θ_D.

2. Determinare la capacità termica $C_V(\mathrm{T})$ nel modello misto Debye-Einstein.

Esercizio 8

Si abbia 1 cm^3 di Argento (107 uma) alla temperatura di 10 K. Nell'approssimazione di Debye, trovare la capacità termica per unità di massa sapendo che la velocità del suono è $2.5 \cdot 10^5$ cm/s. L'Ag ha reticolo FCC con parametro reticolare $a = 4.07$ Å (lato della cella cubica).

Esercizio 9

Un cristallo ha struttura BCC. La capacità termica per unità di volume nel limite classico è $c_V = 1.32 \cdot 10^6$ $Jm^{-3}K^{-1}$. La temperatura di Debye del cristallo vale $\Theta_D = 90$ K. Quanto vale la distanza d tra primi vicini? Quanto vale la velocità del suono v_s ?

Esercizio 10

Un solido che cristallizza in una struttura cubica a corpo centrato (BCC) con lato del cubo $a = 4.0$ Å e base biatomica, presenta i seguenti modi fononici, triplamente degeneri:

$$\omega_{ac} = 88 \sin\left(\frac{qa}{2}\right) \text{ cm}^{-1}$$
$$\omega_{ot} = 180 \text{ cm}^{-1}$$

1. Determinare la temperatura di Debye del solido.
2. Trovare il calore specifico c_v a T = 10 K e T = 700 K.

Giustificare i modelli e le approssimazioni utilizzate.

Esercizio 11

Si assuma che un cristallo di litio metallico venga cresciuto mescolando in uguali proporzioni i due isotopi Li^5 e Li^9. Si ottiene un reticolo cubico semplice, con lato del cubo a, nel quale i due isotopi sono regolarmente alternati nelle tre direzioni dello spazio. La densità del cristallo è $\rho = 0.747$ g/cm^3. La dispersione della branca acustica triplamente degenere è $\omega_{ac} = A \sin\left(\frac{qa}{2}\right)$ e il numero d'onda del fonone ottico a centro zona è $\nu = 318$ cm^{-1}.

1. Ricavare le pulsazioni ottica e acustica a bordo zona.
2. Ricavare la velocità del suono v_s
3. Ricavare la capacità termica a volume costante del solido per unità di volume a T = 3 K e a T = 600 K, assumendo che il vettore d'onda di Debye sia $q_D = 1.05\pi/a$.

La massa media di un nucleone è $m = 1.67 \cdot 10^{-24}$ g.

Esercizio 12

Un solido di cella primitiva cubica con spigolo della cella $a = 3.2$ Å, ha le tre branche acustiche descritte da (T = trasverso, L = longitudinale):

$$\begin{cases} \omega_{AT} = \omega_{AT}^0 \sin\left(\frac{qa}{2}\right) \\ \omega_{AL} = \omega_{AL}^0 \sin\left(\frac{qa}{2}\right) \end{cases} \qquad \text{con} \begin{cases} \omega_{AT}^0 = 4.2 \cdot 10^{12} \text{ rad/s} \\ \omega_{AL}^0 = 3.9 \cdot 10^{12} \text{ rad/s} \end{cases}$$

1. Calcolare la capacità termica $C_V(T)$ del solido per $T << \Theta_D$ e discutere l'applicabilità del modello.

2. Quando varrebbe la capacità nel caso la cella unitaria fosse BCC o FCC, sempre di costante reticolare a?

Esercizio 13 - Es. 2 Esonero I AA 2014/2015

Si abbia una catena lineare biatomica formata da un atomo A di massa M_A ed un atomo B di massa $M_B = 16$ uma. Questi atomi sono separati di $a/2$ e sono disposti lungo l'asse $\hat{x}$. Le costanti di forza sono uguali e l'interazione è a primi vicini. Si ricorda che per questa catena le frequenze a bordo zona valgono $\omega^2 = \frac{2C}{M_A}$ e $\omega^2 = \frac{2C}{M_B}$.

1. Se il rapporto tra la frequenza ottica e quella acustica a bordo zona è 1.5, quanto vale la massa M_A? Sia $M_A > M_B$.

2. Quanto valgono le frequenze acustica ed ottica a bordo zona se la costante di forza $C = 2000$ dyne/cm?

3. Se la densità lineare di massa vale $\rho = 20 \cdot 10^{10}$ uma/m, quanto vale la velocità del suono v_s in questa catena?

4. Trovare ω_D, q_D e la temperatura di Debye Θ_D.

5. Stimare la capacità termica a T=10 K e T=800 K se la catena è formata da N=10^{24} atomi di tipo A e N=10^{24} atomi di tipo B. Usare a bassa temperatura il modello misto di Debye-Einstein. Stimate la temperatura di Einstein dall'energia del fonone ottico a bordo zona e utilizzate la seguente formula per scrivere la capacità termica dovuta a N modi nel modello di Debye:

   $C_v^{\text{Debye}}(T) = \frac{4}{5}\pi^4 N\, K_B \left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3$

Esercizio 14 - Es. 2 Appello I AA 2014/2015

Si abbia una catena lineare biatomica formata da un atomo A di massa M_A ed un atomo B di massa $M_B = 16$ uma. Questi atomi sono separati di $a/2$ e sono disposti lungo l'asse $\hat{x}$. Le costanti di forza sono uguali e l'interazione è a primi vicini. Si ricorda che per questa catena le frequenze a bordo zona valgono $\omega^2 = \frac{2C}{M_A}$ e $\omega^2 = \frac{2C}{M_B}$.

1. Se il rapporto tra la frequenza ottica e quella acustica a bordo zona è 1.5, quanto vale la massa M_A? Sia $M_A > M_B$.

2. Quanto valgono le frequenze acustica ed ottica a bordo zona se la costante di forza $C = 2000$ dyne/cm?

3. Se la densità lineare di massa vale $\rho = 20 \cdot 10^{10}$ uma/m, quanto vale la velocità del suono v_s in questa catena?

4. Trovare ω_D, q_D e la temperatura di Debye Θ_D.

5. Stimare la capacità termica a T=10 K e T=800 K se la catena è formata da N=10^{24} atomi di tipo A e N=10^{24} atomi di tipo B. Usare a bassa temperatura il modello misto di Debye-Einstein. Stimate la temperatura di Einstein dall'energia del fonone ottico a bordo zona e utilizzate la seguente formula per scrivere la capacità termica dovuta a N modi nel modello di Debye:

   $C_v^{\text{Debye}}(T) = \frac{4}{5}\pi^4 N\, K_B \left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3$

Esercizio 15 - Es. 2 Appello II AA 2014/2015

Un solido isotropo di densità $\rho = 5$ g/cm^3 ha un reticolo cubico semplice di lato a. La base è biatomica ed è costituita da un atomo di massa $M_1 = 3$ uma e da un atomo di massa $M_2 = 12$ uma che si alternano a distanza $a/2$ l'uno con l'altro lungo i lati del cubo. Una misura della velocità del suono fornisce il valore $v_s = 4.8 \cdot 10^5$ cm/s.

1. Trovare la frequenza dei modi ottici a centro zona.

2. Calcolare la capacità termica del solido per unità di massa a 30 K utilizzando il modello di Debye, specificando quali modi contribuiscono a questa temperatura.

3. Calcolare la capacità termica del solido per unità di massa ad una temperatura molto maggiore della temperatura di Debye, specificando quali modi contribuiscono a questa temperatura.

Esercizio 16 - Es. 2 Esonero I AA 2015/2016

Un solido anisotropo ha reticolo fcc con lato della cella cubica $a = 2$ Å. La base è costituita da un unico atomo posto su ogni nodo del reticolo. La relazione di dispersione del modo acustico longitudinale è $\omega_L(q) = \omega_0 \sin\left(\frac{qa}{2}\right)$, quella dei modi acustici trasversali degeneri è $\omega_T(q) = \omega_0 \left[\sin\left(\frac{qa}{2}\right) + \sin(qa)\right]$. Si sa inoltre che $\omega_0 = 1.52 \cdot 10^{12}$ rad/s.

1. Trovare le velocità del suono nel solido;

2. calcolare le temperature di Debye del sistema;

3. calcolare la capacità termica reticolare per unità di volume, c_v, a 5 K e a 800 K.

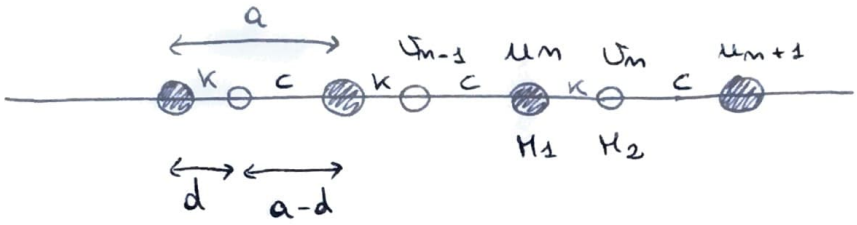
4. Come cambierebbe a 800 K la capacità termica reticolare per unità di volume se il solido avesse base biatomica?

Si ricorda che la velocità del suono è definita come il limite per $q \to 0$ della velocità di gruppo dei fononi. e che il contributo vibrazionale della i-sima branca acustica alla capacità termica reticolare per unità di volume nel modello di Debye è $c_v^i(T) = \frac{4}{5}\pi^4 n K_B \left(\frac{T}{\Theta_D^i}\right)^3$, con $n = N/V$ dove N è il numero di atomi del campione e V il suo volume.

ESERCIZIO 1

Catena lineare biatomica.

I 2 atomi hanno stessa massa $M_1 = M_2 = M$



Le costanti di forza sono rispettivamente K o C tra gli atomi separati di d o a-d.

1) Calcolare relazioni di dispersione per le bande fononiche $\omega = \omega(q)$.

Indichiamo con u_n la coordinata dell'atomo M_1 e con v_n la coordinata dell'atomo M_2.

Se indichiamo solo le interazioni tra primi vicini le rispettive equazioni del moto sono ($M_1 = M_2 = M$)

$$\begin{cases} M\ddot{u}_n = -K(u_n - v_n) - C(u_n - v_{n-1}) \\ M\ddot{v}_n = -C(v_n - u_{n+1}) - K(u_n - v_n) \end{cases}$$

Cerchiamo soluzioni del tipo

$$u_n = A_1 e^{i(qna - \omega t)}$$

$$v_n = A_2 e^{i(q(na+d) - \omega t)}$$

Le andiamo a sostituire sopra e otteniamo:

$$-M\omega^2 A_1 \cancel{e^{i(qma-\omega t)}} = -K\left[A_1 - A_2 e^{iqd}\right] \cancel{e^{i(qma-\omega t)}} - C\Big[A_1 \cancel{e^{i(qma-\omega t)}} + \underbrace{-A_2 e^{i(q[(m-1)a+d]-\omega t}}_{-A_2 \cancel{e^{i(qma-\omega t)}} e^{-iq(a-d)}}\Big]$$

$$\Rightarrow \begin{cases} -M\omega^2 A_1 = -K\left[A_1 - A_2 e^{iqd}\right] - C\left[A_1 - A_2 e^{-iq(a-d)}\right] \\ -M\omega^2 A_2 e^{iqd} = -C\left[A_2 e^{iqd} - A_1 e^{iqa}\right] - K\left[A_2 e^{iqd} - A_1\right] \end{cases}$$

Moltiplichiamo la II per e^{-iqd}

$$\begin{cases} -M\omega^2 A_1 = -K\left[A_1 - A_2 e^{iqd}\right] - C\left[A_1 - A_2 e^{-iq(a-d)}\right] \\ -M\omega^2 A_2 = -C\left[A_2 - A_1 e^{iq(a-d)}\right] - K\left[A_2 - A_1 e^{-iqd}\right] \end{cases}$$

$$(*) \begin{cases} A_1\left[-M\omega^2 + K + C\right] + A_2\left[-K e^{iqd} - C e^{-iq(a-d)}\right] = 0 \\ A_1\left[-K e^{-iqd} - C e^{iq(a-d)}\right] + A_2\left[-M\omega^2 + K + C\right] = 0 \end{cases} \quad (*)$$

Imponiamo che il determinante dei coefficienti di A_1 e A_2 sia nullo:

$$\begin{vmatrix} -M\omega^2 + K + C & -K e^{iqd} - C e^{-iq(a-d)} \\ -K e^{-iqd} - C e^{iq(a-d)} & -M\omega^2 + K + C \end{vmatrix} = 0$$

$$\left(-M\omega^2+k+c\right)^2-\left(ke^{iqd}+ce^{-iq(a-d)}\right)\left(ke^{-iqd}+ce^{iq(a-d)}\right)=0$$

$$M^2\omega^4+\cancel{k^2}+\cancel{c^2}+2(k+c)M\omega^2+2ck-\left[\cancel{k^2}+\cancel{c^2}+ck\underbrace{\left(e^{iqa}+e^{-iqa}\right)}_{2\cos(qa)}\right]=0$$

$$M^2\omega^4+2(k+c)M\omega^2+2ck\left(1-\cos(qa)\right)=0$$

$$\omega^2=\frac{(c+k)\cancel{M}}{M^{\cancel{2}}}\pm\frac{1}{M^{\cancel{2}}}\sqrt{(c+k)^2\cancel{M^2}-2\cancel{M^2}ck\left(1-\cos(qa)\right)}=$$

$$=\frac{c+k}{M}\pm\frac{1}{M}\sqrt{c^2+k^2+2ck\cos(qa)}$$

LEGGE DI DISPERSIONE.

2) Discutere i casi limiti di fononi a centro e bordo zona.

<u>CENTRO ZONA</u> $(q=0)$

$$\omega^2=\frac{c+k}{M}\pm\frac{c+k}{M}$$

$$\Rightarrow\begin{cases}\omega_-^2=0 & \text{branca acustica}\\ \omega_+^2=2\dfrac{c+k}{M} & \text{branca ottica}\end{cases}$$

Inoltre vediamo che:

$$\frac{u_n}{v_n}=\frac{A_1\,e^{i(qna-\omega t)}}{A_2\,e^{i(q(na+d)-\omega t)}}=\frac{A_1}{A_2\,e^{iqd}}\overset{\text{ottico}}{=}\quad (*)$$

$$\frac{u_m}{v_m} = \frac{K e^{iqd} + C e^{-iq(a-d)}}{-M\omega^2 + K + C} \cdot \frac{1}{e^{iqd}} =$$

$$= \left.\frac{K + C e^{-iqa}}{-M\omega^2 + K + C}\right|_{q=0} = \left.\frac{K+C}{-M\omega^2 + K + C}\right|_{\omega_\pm}$$

$$\Rightarrow \quad \frac{u_m}{v_m} = \begin{cases} \dfrac{K+C}{-M\omega_-^2 + K + C} = 1 & \text{acustica} \\[2ex] \dfrac{K+C}{-M\omega_+^2 + K + C} = -1 & \text{ottica} \end{cases}$$

Questo ci dice che nella branca acustica i due atomi si muovono in fase e con la stessa ampiezza ($A_1 = A_2$) mentre nella branca ottica sono sfasati di π, cioè si muovono in direzioni opposte ($A_1 = -A_2$) ma a "centro di massa della cella" fisso.

<u>BORDO ZONA</u> $\left(q = \frac{\pi}{a}\right)$

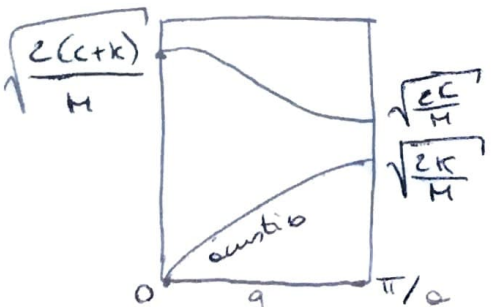
$$\omega^2 = \frac{C+K}{M} \pm \frac{C-K}{M}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \omega_-^2(\pi/a) = \dfrac{2K}{M} & \text{branca acustica} \\[2ex] \omega_+^2(\pi/a) = \dfrac{2C}{M} & \text{branca ottica} \end{cases}$$

Questo per $K < C$

Se $C < K$
ω_- è ottica
ω_+ è acustica

$$\frac{u_m}{v_m} = \frac{A_1}{A_2 e^{iqd}} = \left.\frac{K + C e^{-iqa}}{-M\omega^2 + K + C}\right|_{q=\frac{\pi}{a}} = \begin{cases} -1 & \text{acustica} \\ 1 & \text{ottica} \end{cases}$$

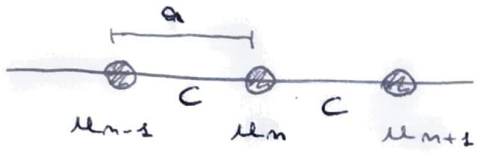


per $K < C$

ESERCIZIO 2.

Catena lineare con $a = 2.5 Å$, velocità del suono 10^5 cm/s.

1) Calcolare la pulsazione di un'onda sonora di lunghezza d'onda $\lambda = 20 Å$.



$$M\ddot{u}_n = -C(u_n - u_{n+1}) - C(u_n - u_{n-1}) =$$

$$= -C(2u_n - u_{n+1} - u_{n-1})$$

$$u_n = A\, e^{i(qna - \omega t)}$$

$$-M\omega^2 \cancel{A e^{i(qna-\omega t)}} = -C \cancel{A e^{i(qna-\omega t)}} \underbrace{(2 - e^{iqa} - e^{-iqa})}_{-2\cos(qa)}$$

$$-M\omega^2 = -2C(1 - \cos(qa)) =$$

$$-M\omega^2 = -2C\, 2\,\mathrm{sen}^2\frac{qa}{2} = -4C\,\mathrm{sen}^2\frac{qa}{2}$$

$$\Rightarrow \omega^2 = 4\frac{C}{M}\mathrm{sen}^2\left(\frac{qa}{2}\right)$$

$$\Rightarrow \boxed{\omega(q) = 2\sqrt{\frac{C}{M}}\left|\mathrm{sen}\left(\frac{qa}{2}\right)\right|}$$ RELAZIONE di DISPERSIONE

~~[illegible]~~

~~[illegible]~~ Per $\lambda \gg 0$ siamo ~~[illegible]~~ a centro zona $(q \sim 0)$ e vale:

$$\omega(q \to 0) \simeq \cancel{2}\sqrt{\frac{C}{M}}\frac{qa}{\cancel{2}} = v_s \cdot q \quad \Rightarrow \quad v_s = \sqrt{\frac{C}{M}}\, a$$

$\Rightarrow$ sostituisco nella relazione di dispersione $\sqrt{\frac{C}{M}} = \frac{v_s}{a}$

$$\Rightarrow \omega(q) = 2\frac{v_s}{a}\left|\mathrm{sen}\left(\frac{qa}{2}\right)\right| = 2\frac{v_s}{a}\left|\mathrm{sen}\,\frac{2\pi}{\lambda}\frac{a}{2}\right| \overset{\lambda = 20Å}{=} 3.06\ 10^{12}\ \mathrm{rad/s}$$

2) Calcolare la temperatura di Debye.

In approssimazione di Debye si considera la prima zona di Brillouin come una sfera di raggio q_D

In 3D: $\frac{4}{3}\pi q_D^3 = \frac{(2\pi)^3}{V}$ → volume della primitiva reticolo diretto

In 1D: $2q_D = 2\frac{\pi}{a}$

$\Rightarrow \boxed{q_D = \frac{\pi}{a}}$ Cioè contiamo tutti gli q fino a bordo zona

Calcoliamo la T di Debye utilizzando

$k_B \Theta_D = \hbar \omega_D$

$\omega_D = v_s \cdot q_D$

$\Rightarrow \Theta_D = \frac{\hbar \omega_D}{k_B} = \frac{\hbar}{k_B} v_s q_D = \frac{\hbar}{k_B} v_s \frac{\pi}{a} = 95.5\,K$

3) Calcolare il contributo del modo acustico con $\lambda = 20\,Å$ all'energia interna per unità di lunghezza della catena a $T = 600\,K$

Poiché siamo a $T \gg \Theta_D$ vale l'approssimazione classica (abbiamo vibrazioni in una sola direzione quindi un solo grado di libertà):

$U = N k_B T$ → $u = \frac{U}{L} = \frac{U}{N \cdot a} = \frac{k_B T}{a} = 3.3\ 10^{-6}\ \frac{erg}{cm}$

N oscillatori indipendenti
N modi acustici

ESERCIZIO 4.

Cristallo con reticolo SC, parametro reticolare $a = 1.5 \text{ Å}$

$\theta_D = 150 K$.

1) Calcolare il calore specifico a $T = 30 K$ e $T = 700 K$.

(A) $T = 30 K \ll \theta_D$ siamo a basse T

Poiché il cristallo è monoatomico abbiamo solo branche acustiche.

Il modello di Debye esprime bene la capacità termica a basse T:

$$C_V(T) = \frac{12}{5} \pi^4 N K_B \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3$$

$\Rightarrow$ il calore specifico è:

$$c_V(T) = \frac{12}{5} \pi^4 \frac{N}{V} K_B \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3 = \frac{12}{5} \pi^4 \underset{\text{densità atomica}}{n} K_B \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3$$

$$n = \frac{N}{V} = \frac{1}{a^3}$$

in un SC abbiamo 1 atomo per cella cubica convenzionale di volume a^3

$$\Rightarrow c_V(T) = \frac{12}{5} \pi^4 \frac{K_B}{a^3} \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3 = 7.65 \ J/K\,cm^3$$

(B) $T = 700 K \gg \theta_D$

Ad alte T vale l'approssimazione classica di Dulong e Petit

$$c_V(T) = \frac{C_V(T)}{V} = \frac{3NK_B}{V} = 3nK_B = \frac{3K_B}{a^3} = 12.24 \ J/K\,cm^3$$

3N oscillatori armonici indip.

2) Ricalcolare $C_V(T)$ per $T = 30K$ e $700K$ nel caso di cristallo biatomico (2 atomi per cella).

Questa volta avrò $3N$ modi acustici e $3N(p-1)$ modi ottici ; p = atomi di base = 2

$\Rightarrow$ $3N$ modi ottici.

(A) $T = 700K \gg \theta_D$

Tutti i modi contribuiscono al C_V, quindi avrò $3N + 3N = 6N$ modi, quindi il C_V raddoppia $C_V = 6nk_B$

(B) $T = 30K \ll \theta_D$

I 3 modi acustici contribuiscono nello stesso modo di quando ho un solo atomo di base, mentre il contributo dei modi ottici lo posso trattare in diversi modi :

- Con il modello di Einstein prendendo il limite a basse temperature

$$C_V \sim e^{-\theta_E/T} = e^{-\frac{\hbar\omega_E}{k_B T}} \qquad T \ll \theta_E$$

Nei dati del problema però non abbiamo la frequenza dei modi ottici ω_E, quindi non possiamo calcolarlo

- Lo trascuro perché il loro contributo tende a zero per $T \to 0$.

$\Rightarrow$ Il C_V rimane lo stesso a $T = 30K$.

ESERCIZIO 6.

Catena lineare biatomica con $a = 3\,\mathring{A}$.

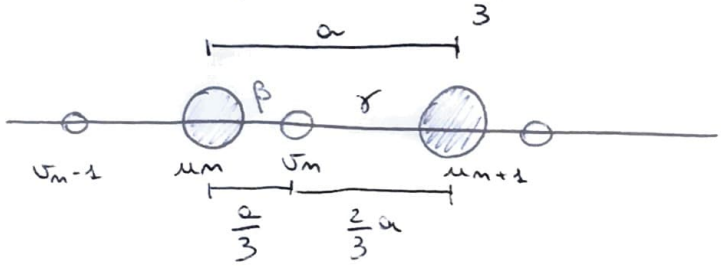
Nella cella primitiva gli atomi sono individuati da $d_1 = 0$ $\quad d_2 = \frac{a}{3}$.

Gli atomi hanno massa uguale $M = 21$ u.m.a.

Le costanti di forza sono:

$\beta = 5\,N/m$ per $d = \frac{a}{3}$

$\gamma = 1\,N/m$ per $d = \frac{2}{3}a$



1) Determinare la velocità del suono v_s.

La velocità del suono la ricaviamo dall'andamento lineare dei modi acustici a piccoli q $(q \to 0)$

$$\omega(q \to 0) \sim v_s \cdot q$$

La legge di dispersione per questa catena lineare la conosciamo già:

$$\omega^2(q) = \frac{\beta+\gamma}{M} \pm \frac{1}{M}\sqrt{\beta^2+\gamma^2+2\beta\gamma\cos(qa)}$$

Sviluppiamo per piccoli q

$$1-\cos x = 2\,\text{sen}^2\frac{x}{2} \quad \to \quad \cos x = 1 - 2\,\text{sen}^2\left(\frac{x}{2}\right) \underset{x\to 0}{\simeq} 1 - 2\left(\frac{x}{2}\right)^2$$

$$\Rightarrow \cos(qa) \underset{q\to 0}{\sim} 1 - 2\left(\frac{qa}{2}\right)^2 = 1 - \frac{(qa)^2}{2}$$

$$\Rightarrow \sqrt{\beta^2+\gamma^2+2\beta\gamma\cos(qa)} \underset{q\to 0}{\sim} \sqrt{\beta^2+\gamma^2+2\beta\gamma\left(1-\frac{(qa)^2}{2}\right)} =$$

$$= \sqrt{\beta^2+\gamma^2+2\beta\gamma-\beta\gamma(qa)^2} = \sqrt{(\beta+\gamma)^2-\beta\gamma(qa)^2} =$$

$$= |\beta+\gamma|\sqrt{1-\frac{\beta\gamma(qa)^2}{(\beta+\gamma)^2}} = |\beta+\gamma|\left(1-\frac{\beta\gamma(qa)^2}{(\beta+\gamma)^2}\right)^{1/2} =$$

$$(1+x)^\alpha \underset{x\to 0}{\sim} 1+\alpha x$$

$$\underset{q\to 0}{\simeq} |\beta+\gamma|\left(1-\frac{1}{2}\frac{\beta\gamma(qa)^2}{(\beta+\gamma)^2}\right)$$

$$\Rightarrow \omega^2(q) \underset{q\to 0}{\sim} \frac{\beta+\gamma}{M} \pm \frac{\beta+\gamma}{M}\left(1-\frac{1}{2}\frac{\beta\gamma(qa)^2}{(\beta+\gamma)^2}\right)$$

Prendiamo l'acustico $(\omega_{AC}(q) = \omega_-(q))$

$$\omega_{AC}^2(q) \underset{q\to 0}{\sim} \frac{1}{2M}\frac{\beta\gamma(qa)^2}{(\beta+\gamma)^2}$$

$$\Rightarrow \omega_{AC}(q\sim 0) = \underbrace{\sqrt{\frac{\beta\gamma}{2M(\beta+\gamma)^2}}\,a}_{=v_s}\,q = v_s\,q$$

$$\Rightarrow v_s = \sqrt{\frac{\beta\gamma}{2M(\beta+\gamma)^2}}\,a = 1037\ m/s$$

2) Determinare Θ_D.

$$q_D = \frac{\pi}{a}, \quad k_B\Theta_D = \hbar\omega_D = \hbar v_s q_D$$

$$\Rightarrow \Theta_D = \frac{\hbar v_s}{k_B}\frac{\pi}{a} = 82.5\ K$$

ESERCIZIO 7.

Cristallo SC con $a = 4\,\mathring{A}$.

Le leggi di dispersione dei fononi acustici e ottici sono date da:

$$\hbar\omega_{AC} = 8\cdot 10^{-3}\,eV \;\; \mathrm{sen}\left(\frac{qa}{2}\right)$$

$$\hbar\omega_{OTT} = 7.5\;10^{-2}\,eV$$ (notare la frequenza + alta)

1) Determinare v_s.

$$\omega_{AC}(q\sim 0) = v_s\cdot q$$

$$\hbar\omega_{AC}(q\sim 0) = 8\;10^{-3}\,eV\left(\frac{qa}{2}\right)$$

$$\Rightarrow v_s = \frac{8\;10^{-3}\,eV}{\hbar}\,\frac{a}{2} = 2508\;m/s$$

Oppure $$v_s = \left.\frac{\partial\omega_k}{\partial q}\right|_{q=0} = \frac{8\;10^{-3}\,eV}{\hbar}\,\frac{a}{2}\cos\left(\frac{qa}{2}\right)\Big|_{q=0} =$$

$$= \frac{8\;10^{-3}\,eV}{\hbar}\,\frac{a}{2}$$

2) Determinare θ_D.

Ricaviamo q_D per la cella SC:

$$\frac{4}{3}\pi q_D^3 = \frac{(2\pi)^3}{V} = \left(\frac{2\pi}{a}\right)^3 \Rightarrow q_D^3 = \frac{\cancel{8}^{\,2}\pi^{\cancel{3}\,2}}{a^3}\,\frac{3}{\cancel{4\pi}} = \frac{6\pi^2}{a^3}$$

V → volume cella unitaria

$$\Rightarrow q_D = \frac{\sqrt[3]{6\pi^2}}{a}$$

$$\Rightarrow \theta_D = \frac{\hbar}{k_B}\omega_D = \frac{\hbar}{k_B}v_s q_D = \frac{\hbar}{k_B}v_s\,\frac{\sqrt[3]{6\pi^2}}{a} = 187\,K$$

3) Determinare Θ_E.

$$\Theta_E = \frac{\hbar \omega_E}{k_B} = \frac{\hbar \omega_0 \pi}{k_B} = \frac{7.5\ 10^{-2}\ eV}{8.62\ 10^{-5}\ eV/K} = 870K$$

4) Determinare $C_V(T)$ nel modello misto Debye-Einstein.

3N modi acustici → Modello di Debye per $T \ll \Theta_D$

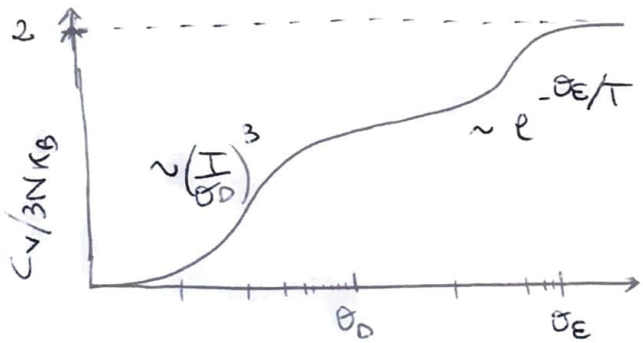
$$C_V = \frac{12}{5} \pi^4 N k_B \left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3$$

3N modi ottici → Modello di Einstein per temperature intermedie $\Theta_D < T \ll \Theta_E$

$$C_V = 3N k_B e^{-\Theta_E/T}$$

Infine, ad alte T ($T \gg \Theta_E \gg \Theta_D$) → modello Dulong-Petit

$$C_V = 6Nk_B$$



ESERCIZIO 8.

Si abbia 1 cm^3 di Argento (107 u.m.a.) alla temperatura di 10 K

La velocità del suono è $v_s = 2.5\ 10^5\ cm/s$

L'argento ha reticolo fcc con parametro reticolare $a = 4.07 Å$ con a lato della cella cubica convenzionale.

- Determinare la capacità termica per unità di massa $\frac{C_V}{M}$.

Il testo originale ci dice già che siamo in approx di Debye ma noi lo verifichiamo.

Sappiamo che $\theta_D = \frac{\hbar \omega_D}{k_B} = \frac{\hbar v_s}{k_B} q_D$

Nel modello di Debye approssimiamo la prima zona di Brillouin con una sfera di raggio q_D

$$\frac{4}{3}\pi q_D^3 = \frac{(2\pi)^3}{V}$$

$$\Rightarrow q_D = \sqrt[3]{\frac{(6\pi)^2}{V}}$$

V è il volume della cella primitiva unitaria (che contiene un solo atomo) del reticolo diretto

Quindi per cristallo sc $V_{sc} = a^3$ $q_D = \frac{\sqrt[3]{6\pi^2}}{a}$

per cristallo bcc $V_{bcc} = \frac{a^3}{2}$ $q_D = \frac{\sqrt[3]{12\pi^2}}{a}$

per cristallo fcc $V_{fcc} = \frac{a^3}{4}$ $q_D = \frac{\sqrt[3]{24\pi^2}}{a}$

Quindi per l'argento avremo

$$\theta_D = \frac{\hbar v_s}{k_B} \frac{\sqrt[3]{24\pi^2}}{a} = 297\,K$$

$T = 10K \ll \theta_D \Rightarrow$ approssimazione di Debye.

$$\frac{C_V}{M} = \frac{12}{5}\pi^4 k_B \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3 \frac{N}{M} = \frac{12}{5}\pi^4 k_B \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3 \frac{1}{m_{Ag}}$$

$$\Rightarrow \frac{C_V(10K)}{M} = 0.68\ J/kg \cdot K$$

ESERCIZIO 9.

Un cristallo ha struttura BCC.
La capacità termica per unità di volume nel limite classico è $c_V = \frac{C_V}{V} = 1.32 \; 10^6 \; J m^{-3} K^{-1}$.
La temperatura di Debye del cristallo è $\vartheta_D = 90 K$.

1) Quanto vale la distanza tra primi vicini?

La distanza tra primi vicini in un reticolo bcc è data dalla distanza del centro della cella cubica dall'origine:

$$d_{P.V.} = \frac{\sqrt{3}}{2} a$$

Dobbiamo quindi ricavarci il parametro reticolare a dall'informazione sul c_V nel limite classico:

$$C_V = 3 N K_B \rightarrow \frac{C_V}{V} = 3 \frac{N}{V} K_B = 3 n K_B$$

n è la densità di atomi

in un bcc $n = \frac{2}{a^3} \rightarrow c_V = \frac{C_V}{V} = \frac{6 K_B}{a^3}$

$$\Rightarrow a = \sqrt[3]{\frac{6 K_B}{c_V}} \Rightarrow d_{P.V.} = \frac{\sqrt{3}}{2} \sqrt[3]{\frac{6 K_B}{c_V}} = 3.46 \text{ Å}$$

2) Determinare la velocità del suono.

$$K_B \vartheta_D = \hbar \omega_D = \hbar v_s q_D \rightarrow v_s = \frac{K_B \vartheta_D}{\hbar q_D}$$

Per un bcc $q_D = \frac{\sqrt[3]{12 \pi^2}}{a}$

$$\Rightarrow v_s = \frac{K_B \vartheta_D}{\hbar} \frac{a}{\sqrt[3]{12 \pi^2}} = 960 \text{ m/s}$$

ESERCIZIO 10.

Un solido cristallizza in una struttura bcc con lato del cubo $a = 40 \text{Å}$ e base bistomica.

Esso presenta i seguenti modi fononici, triplamente degeneri:

$$\begin{cases} \omega_{AC} = (88\ cm^{-1}) \sin\left(\frac{qa}{2}\right) \\ \omega_{OT} = 180\ cm^{-1} \end{cases}$$

1) Determinare la temperatura di Debye del solido

$$\theta_D = \frac{\hbar v_s}{K_B} q_D$$

per un bcc $\quad q_D = \frac{\sqrt[3]{12\pi^2}}{a}$

le frequenze in cm^{-1} sono numeri d'onda $\tilde{\nu} = \frac{\nu}{c}$ $\Rightarrow$ $\omega = 2\pi c \tilde{\nu}$ (s^{-1}, cm^{-1})

$$v_s = \left.\frac{d\omega_{AC}}{dq}\right|_{q=0} = 88\ cm^{-1} \frac{a}{2} = 88 \cdot (2\pi c) \frac{a}{2} = 3.3\ 10^5\ cm/s$$

$$\Rightarrow \theta_D = \frac{\hbar}{K_B} v_s \frac{\sqrt[3]{12\pi^2}}{a} = 310\ K$$

2) Determinare il calore specifico $c_V = \frac{C_V}{V}$ a $T = 10\ K$

$T = 10\ K \ll \theta_D \Rightarrow$ bassa T uso il modello di Debye

$$c_V = \frac{C_V}{V} = \frac{12}{5}\pi^4 \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3 \frac{N}{V} K_B$$

Questa volta ho un bcc decorato, quindi i 3N modi acustici vengono dalle N celle primitive bcc

$\Rightarrow$ V lo scrivo come $V = N \cdot v_{\text{cella bcc}} = N \frac{a^3}{2} \Rightarrow \frac{N}{V} = \frac{2}{a^3}$

$$\Rightarrow c_V^{(10K)} = \frac{12}{5}\pi^4 \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3 \frac{2}{a^3} k_B = 3.4\ 10^4\ \text{erg}/\text{cm}^3\text{K}$$

Controllo la temperatura degli ottici

$$T_{OT} = \frac{\hbar 2\pi c\, \omega_{OT}}{k_B} = 259\text{K} \Rightarrow$$ a $T = 10$K gli ottici non sono attivati quindi potrei trascurarli

$$\frac{C_V}{V} = \frac{3Nk_B}{N} e^{-\theta_E/T} = \frac{6k_B}{a} e^{-\theta_E/T} = 1.5\ 10^{-4}\ \text{erg}/\text{cm}^3\text{K}$$ → infatti è trascurabile!

3) Determinare $c_V = \frac{C_V}{V}$ a $T = 700$K

$T = 700\text{K} \gg \theta_D, T_{OT}$

quindi uso Dulong e Petit ed ho $6N$ modi attivati ($3N$ acustici e $3N$ ottici).

$$c_V(700\text{K}) = 6\frac{N}{V}k_B = 6\frac{2}{a^3}k_B = 5.2\ 10^7\ \text{erg}/\text{cm}^3\text{K}$$

ESERCIZIO 12.

Un solido di cella primitiva cubica con $a = 3.2\ \mathring{A}$ ha 3 branche acustiche (1 longitudinale e 2 trasversali), descritte da:

$$\begin{cases} \omega_{AT} = \omega^0_{AT} \sin\left(\frac{qa}{2}\right) \\ \omega_{AL} = \omega^0_{AL} \sin\left(\frac{qa}{2}\right) \end{cases} \quad \text{con} \quad \begin{cases} \omega^0_{AT} = 4.2\ 10^{12}\ rad/s \\ \omega^0_{AL} = 3.3\ 10^{12}\ rad/s \end{cases}$$

- Calcolare la capacità termica per unità di volume $\frac{C_V(T)}{V}$ del solido per $T \ll \Theta_D$.

Soluzione:

Nell' sc il numero di celle è uguale al numero di atomi.

Per $T \ll \Theta_D$ ognuno dei tre modi contribuisce a $C_V(T)$

con:
$$C_V^i(T) \simeq \frac{4\pi^4}{5} N K_B \left(\frac{T}{\Theta_D^i}\right)^3$$

questo perché le velocità dei suoni longitudinali e trasversali saranno diverse e daranno Θ_D diversi

$$\Rightarrow \quad C_V(T) = \frac{4}{5}\pi^4 N K_B \left(\frac{T}{\Theta_D^L}\right)^3 + 2 \cdot \frac{4}{5}\pi^4 N K_B \left(\frac{T}{\Theta_D^T}\right)^3 =$$

$$= \frac{4}{5}\pi^4 N K_B \left[\left(\frac{T}{\Theta_D^L}\right)^3 + 2\left(\frac{T}{\Theta_D^T}\right)^3\right]$$

Andiamo a vedere chi sono Θ_D^L e Θ_D^T

$$\Theta_D^L = \frac{\hbar v_L}{K_B} q_D = \frac{\hbar v_L}{K_B} \frac{\sqrt[3]{6\pi^2}}{a} \qquad \text{per sc} \quad q_D = \frac{\sqrt[3]{6\pi^2}}{a}$$

$$\Theta_D^T = \frac{\hbar v_T}{K_B} q_D = \frac{\hbar v_T}{K_B} \frac{\sqrt[3]{6\pi^2}}{a}$$

Dalle leggi di dispersione ci troviamo le velocità del suono:

$$v_T = \lim_{q \to 0} \frac{d\omega_{AT}}{dq} = \frac{a}{2}\omega^0_{AT}$$

$$v_L = \lim_{q \to 0} \frac{d\omega_{AL}}{dq} = \frac{a}{2}\omega^0_{AL}$$

$$\Rightarrow \frac{C_V(T)}{V} = \frac{4}{5}\pi^4 \frac{N}{V} K_B T^3 \left(\left(\frac{1}{\theta_D^L}\right)^3 + \left(\frac{1}{\theta_D^T}\right)^3 \right)$$

$$\frac{N}{V} = n = \frac{1}{a^3} \quad (SC)$$

$$\Rightarrow \frac{C_V(T)}{V} = \frac{4}{5}\pi^4 \frac{K_B}{\cancel{a^3}} T^3 \frac{1}{\left(\frac{\hbar \sqrt[3]{6\pi^2}}{K_B \cancel{a}}\right)^3} \left[\frac{1}{v_L^3} + \frac{2}{v_T^3} \right] =$$

$$= \frac{\cancel{4}^{\,2}}{5}\pi^{\cancel{4}\,2} K_B^4 T^3 \frac{1}{\hbar^3 \cancel{6\pi^2}_{\,3}} \left[\frac{1}{\left(\frac{a}{2}\omega^0_{AL}\right)^3} + \frac{2}{\left(\frac{a}{2}\omega^0_{AT}\right)^3} \right] =$$

$$= \frac{2}{15}\pi^2 K_B^4 \frac{T^3}{\hbar^3} \frac{8}{a^3} \left(\frac{1}{\omega^0_{AL}{}^3} + \frac{2}{\omega^0_{AT}{}^3} \right) =$$

$$= \frac{2\pi^2 (1.38\ 10^{-23}\ J K^{-1})^4 \cdot 8}{15 (1.054\ 10^{-34}\ J \cdot s)^3 (3.2\ 10^{-10}\ m)^3} \left(\frac{1}{(3.9\ 10^{12}\ s^{-1})^3} + \frac{2}{(4.2\ 10^{12}\ s^{-1})^3} \right) \cdot T^3$$

$$= 436.85 \cdot T^3 \quad J/K^4 m^3$$

Esercizio 13 - (I Esonero I AA 2014/2015)

Si abbia una catena lineare biatomica formata da un atomo A di massa M_A ed un atomo B di massa $M_B = 16$ uma. Questi atomi sono separati di $a/2$ e sono disposti lungo l'asse $\hat{x}$. Le costanti di forza sono uguali e l'interazione è a primi vicini. Si ricorda che per questa catena le frequenze a bordo zona valgono $\omega^2 = \frac{2C}{M_A}$ e $\omega^2 = \frac{2C}{M_B}$.

1. Se il rapporto tra la frequenza ottica e quella acustica a bordo zona è 1.5, quanto vale la massa M_A? Sia $M_A > M_B$.

2. Quanto valgono le frequenze acustica ed ottica a bordo zona se la costante di forza $C = 2000$ dyne/cm?

3. Se la densità lineare di massa vale $\rho = 20 \cdot 10^{10}$ uma/m, quanto vale la velocità del suono v_s in questa catena?

4. Trovare ω_D, q_D e la temperatura di Debye Θ_D.

5. Stimare la capacità termica a T=10 K e T=800 K se la catena è formata da N=10^{24} atomi di tipo A e N=10^{24} atomi di tipo B. Usare a bassa temperatura il modello misto di Debye-Einstein. Stimate la temperatura di Einstein dall'energia del fonone ottico a bordo zona e utilizzate la seguente formula per scrivere la capacità termica dovuta a N modi nel modello di Debye:

   $C_v^{\text{Debye}}(T) = \frac{4}{5}\pi^4 N\, K_B \left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3$

Soluzione

PUNTO 1

Poiché $M_A > M_B$, a bordo zona si ha:

$$\omega_{AC} = \sqrt{\frac{2C}{M_A}} \qquad \text{ACUSTICA}$$

$$\omega_{OT} = \sqrt{\frac{2C}{M_B}} \qquad \text{OTTICA}$$

Dal rapporto possiamo trovare la massa M_A:

$$\frac{\omega_{OT}}{\omega_{AC}} = \sqrt{\frac{M_A}{M_B}} = 1.5 \implies M_A = (1.5)^2\, M_B = 36 \text{ uma}$$

PUNTO 2

Le frequenze a bordo zona:

$$\omega_{OT} = \sqrt{\frac{2C}{M_B}} = \sqrt{\frac{2 \cdot 2000 \text{ dyne/cm}}{16 \cdot 1.66 \cdot 10^{-24}\text{g}}} = 1.23 \cdot 10^{13} \text{ rad/s}$$

$$\omega_{AC} = \frac{\omega_{OT}}{1.5} = 0.82 \cdot 10^{13} \text{ rad/s}$$

PUNTO 3

La velocità del suono si trova dallo sviluppo per piccoli q del modo acustico:

$$v_s = \sqrt{\frac{C}{2(M_A + M_B)}}\, a$$

a si ricava dalla densità:

$$\rho = \frac{(M_A + M_B)}{a} \implies a = \frac{M_A + M_B}{\rho} = \frac{(36+16)\text{uma}}{20 \cdot 10^{10}\text{uma/m}} = 2.6 \text{ Å}$$

troviamo la velocità del suono:

$$v_s = \sqrt{\frac{2000\text{dyne/cm}}{2(36+16) \cdot 1.66 \cdot 10^{-24}\text{g}}}\, 2.6 \text{ Å} = 885.0 \text{ m/s}$$

PUNTO 4

Se indichiamo con N il numero di celle primitive e con L la lunghezza della catena lineare, per quest'ultima abbiamo $N = L/a$ modi acustici. Utilizzando la densità degli stati si ha:

$$N = \int_0^{\omega_D} D(\omega) d\omega = \int_0^{\omega_D} \frac{L}{\pi v_s} d\omega = \frac{L}{\pi v_s}\omega_D = \frac{Na}{\pi v_s}\omega_D$$

Semplificando N, troviamo la frequenza di Debye:

$$\omega_D = \frac{\pi}{a} v_s = 1.07 \cdot 10^{13} \text{ rad/s}$$

Dalla:

$$\hbar\omega_D = K_B \theta_D = \hbar v_s q_D \tag{1}$$

Calcoliamo q_D e θ_D:

$$q_D = \frac{\omega_D}{v_s} = \frac{\pi}{a} = 1.2 \text{ Å}^{-1}$$

$$\theta_D = \frac{\hbar}{K_B}\omega_D = \frac{1.054 \cdot 10^{-34}\text{J s}}{1.38 \cdot 10^{-23}\text{J K}^{-1}} 1.07 \cdot 10^{13} \text{ rad/s} = 81.7 \text{ K}$$

Nel modello di Debye si approssima la prima zona di Brillouin con una sfera di raggio q_D di pari volume: in 1D questa non è più un'approssimazione e q_D è proprio uguale a metà zona di Brillouin. Cioè per i modi acustici dobbiamo contare tutti gli q fino a bordo zona. Nell'esercizio si poteva anche trovare direttamente il q_D tramite:

$$2q_d = \frac{2\pi}{a} \implies q_D = \frac{\pi}{a}$$

e poi utilizzare la (1) per trovare ω_D e Θ_D.

PUNTO 5

Per questa catena descriviamo gli N modi acustici come N oscillatori di Debye e gli N modi ottici come N oscillatori di Einstein.

A T=10 K possiamo usare l'espressione della capacità termica a volume costante per $T << \Theta_D$ per N modi acustici:

$$C_V^D(T) = \frac{4}{5}\pi^4 N K_B \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3$$

Gli N modi ottici si possono trattare col modello di Einstein. Stimiamo ω_E dalla frequenza ottica a bordo zona (come suggerito nel testo dell'esercizio):

$$\omega_E = \omega_{OT}(\pi/a) = 1.23 \cdot 10^{13} \text{ rad/s}$$

Alla quale corrisponde una temperatura di Einstein θ_E:

$$\hbar\omega_E = K_B\theta_E \implies \theta_E = \frac{\hbar}{K_B}\omega_E = \frac{1.054 \cdot 10^{-34}\text{J s}}{1.38 \cdot 10^{-23}\text{J K}^{-1}} 12.3 \cdot 10^{12} \text{ rad/s} = 93.9 \text{ K}$$

Il contributo degli N modi ottici Ãš, nel modello di Einstein:

$$C_V^E(T) = NK_B \left(\frac{\hbar\omega_E}{K_B T}\right)^2 \frac{e^{\hbar\omega_E/K_B T}}{(e^{\hbar\omega_E/K_B T} - 1)^2} = NK_B \left(\frac{\theta_E}{T}\right)^2 \frac{e^{\theta_E/T}}{(e^{\theta_E/T} - 1)^2}$$

La temperatura di Debye e quella di Einstein non sono molto lontane, per cui a T=10 K dobbiamo considerare entrambi i contributi alla C_V. La capacità termica totale sarà dunque la somma dei due contributi:

$$\begin{aligned}
C_V(10K) &= C_V^D(10K) + C_V^E(10K) \\
&= NK_B \left(\frac{4}{5}\pi^4 \left(\frac{10}{81.7}\right)^3 + \left(\frac{93.7}{10}\right)^2 \frac{e^{93.7/10}}{(e^{93.7/10} - 1)^2}\right) \\
&= 10^{24} \cdot 1.38 \cdot 10^{-23} \text{ J K}^{-1}(1.43 \cdot 10^{-1} + 0.07 \cdot 10^{-1}) \\
&= (1.97 + 0.10) \text{ J K}^{-1} \\
&= 2.1 \text{ J K}^{-1}
\end{aligned}$$

Il contributo è praticamente tutto dovuto ai modi acustici, quelli ottici iniziano a contribuire a temperature maggiori.

Ad alta temperatura possiamo utilizzare la legge di Dulong e Petit per 2N oscillatori:

$$C_V(T) = 2NK_B = 2 \cdot 10^{24} \cdot 1.38 \cdot 10^{-23}\text{J K}^{-1} = 27.6 \text{ J K}^{-1}$$

Esercizio 14 - Es. 2 Appello I AA 2014/2015[1]

Un metallo di valenza 3 ha una struttura cubica semplice con base monoatomica e una densità elettronica $n_{el} = 3.66 \cdot 10^{29}$ m^{-3}. Le tre branche acustiche (una longitudinale e due trasverse) sono descritte dalle seguenti leggi di dispersione:

$$\omega_{AL}(q) = \omega_{AL}^0 \sin\left(\frac{qa}{2}\right)$$
$$\omega_{AT}(q) = \omega_{AT}^0 \sin\left(\frac{qa}{2}\right)$$

Dove la T indica il modo trasverso, la L il modo longitudinale e $\omega_{AL}^0 = 2.4 \cdot 10^{12}$ rad/s. La temperatura di Debye del modo trasverso vale $\Theta_D^T = 45.7$ K.

1. Trovare la costante reticolare a e il vettore d'onda di Debye.
2. Trovare i valori delle velocità del suono.
3. Il contributo dei fononi alla capacità termica per unità di volume del solido, misurata a bassa temperatura e a volume costante, segue l'andamento in temperatura:

$$c_v(T) = BT^3$$

   Dire quanto vale β e calcolare il valore della costante B e di c_v a 1 K.

Soluzione

1. Gli atomi del sistema sono trivalenti, quindi la densità atomica n_{at} è:

$$n_{at} = \frac{1}{3}\, n_{el} = \frac{1}{3}\, 3.66 \cdot 10^{29}\text{m}^{-3} = 1.22 \cdot 10^{29}\text{m}^{-3}$$

   inoltre per il reticolo SC, se a è il lato della cella cubica: Troviamo il vettore d'onda di Debye k_D : $k_D = \sqrt[3]{6\pi^2 n_{at}} = 1.93 \cdot 10^{10}$ m^{-1}.

2. Dalla definizione di velocità del suono si ha:

$$v_L = \lim_{q \to 0} \left(\frac{d\omega_{AL}}{dq}\right) = \frac{a}{2}\, \omega_{AL}^0 = \frac{2 \cdot 10^{-10}\text{m}}{2}\, 2.4 \cdot 10^{12}\text{s}^{-1} = 240 \text{ m/s}$$

   Dalla temperatura di Debye del modo trasverso ricaviamo v_T:

$$v_T = \frac{K_B}{\hbar} \frac{\Theta_D^T}{k_D} = \frac{1.38 \cdot 10^{-23}}{1.054 \cdot 10^{-34}} \frac{45.7}{1.93 \cdot 10^{10}} \text{ m/s} = 310 \text{ m/s}$$

3. In generale c_v è la somma del contributo elettronico ($\sim T$) e del contributo reticolare ($\sim T^3$ - modello di Debye). Pertanto nel contributo reticolare si ha $\beta = 3$.

   Nel modello di Debye, ogni modo apporta al c_v reticolare un contributo di $\frac{4}{5}\pi^4 n_{at} K_B (T/\Theta_D)^3$; il nostro cristallo possiede 1 modo longitudinale e 2 trasversali con temperature di Debye differenti

[1] Versione senza calore specifico elettronico

(Θ_D^L e Θ_D^T), per cui il c_v reticolare si scrive come:

$$c_v(T) = \frac{4}{5}\,\pi^4\, n_{at} K_B \left[\frac{1}{{\Theta_D^L}^3} + \frac{2}{{\Theta_D^T}^3}\right] T^3 = \frac{2}{15}\pi^2 \frac{K_B^4}{\hbar^3}\left[\frac{1}{{v_L}^3} + \frac{2}{{v_T}^3}\right] T^3 = BT^3$$

Per confronto otteniamo il valore della costante B:

$$B = \frac{2}{15}\pi^2 \frac{K_B^4}{\hbar^3}\left[\frac{1}{{v_L}^3} + \frac{2}{{v_T}^3}\right] = \frac{2}{15}\pi^2 \frac{(1.38\cdot 10^{-23})^4}{(1.054\cdot 10^{-34})^3}\left[\frac{1}{240^3} + \frac{2}{310^3}\right]\ \mathrm{J/m^3K^4} = 5.7\cdot 10^3\ \mathrm{J/m^3K^4}$$

e il valore del c_v a 1 K:

$$c_v(1\ \mathrm{K}) = 5.7\cdot 10^3\ \mathrm{J/m^3K^4}(1\ \mathrm{K})^3 = 5.7\cdot 10^3\ \mathrm{J/m^3K}$$

Esercizio 15 - Es. 2 Appello II AA 2014/2015

Un solido isotropo di densità $\rho = 5$ g/cm^3 ha un reticolo cubico semplice di lato a. La base è biatomica ed è costituita da un atomo di massa $M_1 = 3$ uma e da un atomo di massa $M_2 = 12$ uma che si alternano a distanza $a/2$ l'uno con l'altro lungo i lati del cubo. Una misura della velocità del suono fornisce il valore $v_s = 4.8 \cdot 10^5$ cm/s.

1. Trovare la frequenza dei modi ottici a centro zona.
2. Calcolare la capacità termica del solido per unità di massa a 30 K utilizzando il modello di Debye, specificando quali modi contribuiscono a questa temperatura.
3. Calcolare la capacità termica del solido per unità di massa ad una temperatura molto maggiore della temperatura di Debye, specificando quali modi contribuiscono a questa temperatura.

Soluzione

1. La frequenza dei tre modi ottici (degeneri) a centro zona è data da: $\omega_O = \sqrt{2C\left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2}\right)}$
   La costante di forza C si ricava invertendo la formula della velocità del suono $v_s = a\sqrt{\frac{C}{2(M_1+M_2)}}$, la cui unica incognita è il paramentro reticolare a (che si ricava dal dato della densità). Per cui:

$$a = \left(\frac{M_1 + M_2}{\rho}\right)^{1/3} = \left(\frac{15 \cdot 1.66 \cdot 10^{-24}\ \text{g}}{5\ \text{g/cm}^3}\right)^{1/3} = 1.71 \cdot 10^{-8}\ \text{cm}$$

$$C = 2(M_1 + M_2)\left(\frac{v_s}{a}\right)^2 = 2 \cdot 15 \cdot 1.66 \cdot 10^{-24}\ \text{g}\left(\frac{4.8 \cdot 10^5\ \text{cm/s}}{1.71 \cdot 10^{-8}\ \text{cm}}\right)^2 = 3.9 \cdot 10^4\ \text{dyne/cm}^2$$

$$\omega_O = \sqrt{2 \cdot \left(3.9 \cdot 10^4\ \text{dyne/cm}^2\right)\frac{1}{1.66 \cdot 10^{-24}\ \text{g}}\left(\frac{1}{3} + \frac{1}{12}\right)} = 1.40 \cdot 10^{14}\ \text{rad/s}$$

2. In 3D, la frequenza di Debye è: $\omega_D = v_s\left(\frac{6\pi^2 N}{V}\right)^{1/3}$
   La temperatura di Debye è quindi:

$$\Theta_D = \frac{\hbar\omega_D}{K_B} = \frac{\hbar}{K_B}v_s\left(\frac{6\pi^2 N}{V}\right)^{1/3} = \frac{1.05 \cdot 10^{-27}}{1.38 \cdot 10^{-16}}\frac{4.8 \cdot 10^5}{1.7 \cdot 10^{-8}}\sqrt[3]{6\pi^2}\ \text{K} = 738\ \text{K}$$

   Indicando con M la massa del solido, la capacità termica per unità di massa $c_v^M(T)$ nel modello di Debye (consideriamo solo i 2N modi acustici) risulta essere:

$$c_v^M(T) = \frac{C_v(T)}{M} = \frac{12}{5}\pi^4\frac{N}{M}K_B\left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3 = \frac{12}{5}\pi^4\frac{V}{a^3}\frac{1}{\rho V}K_B\left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3 = \frac{12}{5}\pi^4\frac{1}{a^3\rho}K_B\left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3$$

$$c_v^M(30\ \text{K}) = 8.67 \cdot 10^4\ \text{erg K}^{-1}\text{g}^{-1}$$

3. Ad alta temperatura contribuiscono anche i 3N modi ottici, quindi per valutare $c_v^M(T)$ usiamo il modello di Dulong-Petit per 6N oscillatori:

$$c_v^M(T) = 6NK_B\frac{1}{M} = 6\frac{K_B}{a^3\rho} = \frac{6}{(1.71 \cdot 10^{-8}\ \text{cm})^3}\frac{1.38 \cdot 10^{-23}\ \text{J/K}}{5\text{g/cm}^3} = 3.31 \cdot 10^7\ \text{erg K}^{-1}\text{g}^{-1}$$