Fisica della Materia Condensata
Prof. Paola Gallo
Esonero - 11 Novembre 2025

Esercizio 1

Si consideri un cristallo AB_2 di struttura cubica semplice con una base atomica costituita da un atomo di tipo A nell'origine e due atomi di tipo B posizionati a $\vec{d}_1 = \frac{a}{4}\begin{pmatrix}1 & 1 & 1\end{pmatrix}$ e $\vec{d}_2 = -\frac{a}{4}\begin{pmatrix}1 & 1 & 1\end{pmatrix}$, essendo a il lato del cubo. La riflessione al primo ordine con raggi X di lunghezza d'onda $\lambda = 0{,}12\,\mathrm{nm}$ ha luogo ad un angolo totale $\theta^{(1)} = 25°$. Sia il fattore di forma dell'atomo B pari alla metà di quello dell'atomo A ($f_B = f_A/2$).

1. Studiare il fattore di struttura.
2. Determinare il parametro reticolare a.
3. Trovare l'angolo $\theta^{(2)}$ al quale si osserva la seconda diffrazione specificando a quale vettore del reticolo reciproco è associata.
4. Determinare la densità di massa del cristallo, sapendo che la massa di AB_2 è 120 u.m.a.

Esercizio 2

Un solido anisotropo ha reticolo fcc con lato della cella cubica $a = 3\,\text{Å}$. La base è costituita da un unico atomo posto su ogni nodo del reticolo.
La relazione di dispersione del modo acustico longitudinale è $\omega_L(q) = \omega_0 \sin(\frac{a}{2}q)$, quella dei modi acustici trasversali degeneri è $\omega_T(q) = \omega_0[\sin(\frac{a}{2}q) + \sin(aq)]$. Si sa inoltre che vale $\omega_0 = 2{,}15 \times 10^{12}\,\mathrm{rad/s}$.

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 $8\,\mathrm{K}$ e a $600\,\mathrm{K}$.
4. Come cambierebbe C_V a $600\,\mathrm{K}$ se il solido avesse base biatomica?

$$
\begin{aligned}
k_B &= 1{,}38 \times 10^{-23}\,\mathrm{J/K} = 8{,}62 \times 10^{-5}\,\mathrm{eV/K} \\
\hbar &= 1{,}054 \times 10^{-34}\,\mathrm{J\,s} = 6{,}583 \times 10^{-16}\,\mathrm{eV\,s} \\
m_p &= 1{,}67 \times 10^{-27}\,\mathrm{kg}\ \text{(massa del protone)}
\end{aligned}
$$

Soluzione esercizio 1

1. Il fattore di struttura $F(\vec{G})$ è dato da:

$$F(\vec{G}) = N \sum_j f_j e^{-i\vec{G}\cdot\vec{d}_j}$$

Il vettore del reticolo reciproco è $\vec{G} = \frac{2\pi}{a}(h\hat{x} + k\hat{y} + l\hat{z})$ per un cubico semplice. La nostra base è composta da 3 atomi:

- Atomo A: $\vec{d}_A = 0$, fattore f_A
- Atomo B: $\vec{d}_1 = \frac{a}{4}(1,1,1)$, fattore $f_B = f_A/2$
- Atomo B: $\vec{d}_2 = -\frac{a}{4}(1,1,1)$, fattore $f_B = f_A/2$

Calcoliamo i prodotti scalari:

$$\vec{G}\cdot\vec{d}_1 = \left[\frac{2\pi}{a}(h,k,l)\right]\cdot\left[\frac{a}{4}(1,1,1)\right] = \frac{\pi}{2}(h+k+l)$$

$$\vec{G}\cdot\vec{d}_2 = -\frac{\pi}{2}(h+k+l)$$

e sostituiamoli nel fattore di struttura:

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

Dunque per n intero:

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

2. Dallo studio del fattore di struttura (punto 1), dobbiamo trovare la prima riflessione permessa per i vettori del reticolo reciproco. In ordine di modulo crescente abbiamo $\{1\quad 0\quad 0\}$, $\{1\quad 1\quad 0\}$ e $\{1\quad 1\quad 1\}$.

   - Piani $\{1\quad 0\quad 0\}$, $(h+k+l=1)$: $F \neq 0$. **Permessa**.

   La riflessione al primo ordine $\theta^{(1)}$ è associata al primo vettore non estinto, $\vec{G}_{100}$ (con $|\vec{G}_{100}| = \frac{2\pi}{a}$). $\vec{G}_{100}$ deve soddisfare:

$$|\vec{G}_{100}| = \frac{4\pi}{\lambda}\sin\left(\frac{\theta^{(1)}}{2}\right) \implies \frac{2\pi}{a} = \frac{4\pi}{\lambda}\sin\left(\frac{\theta^{(1)}}{2}\right).$$

   Risolvendo per a:

$$a = \frac{\lambda}{2\sin(\theta^{(1)}/2)} = \frac{0{,}12\,\mathrm{nm}}{2\sin(12{,}5^\circ)} \approx 0{,}277\,\mathrm{nm}.$$

3. $\theta^{(2)}$ corrisponde al secondo vettore $\vec{G}$ non estinto. Analizziamo i piani in ordine:

   - $\big(1\quad 0\quad 0\big)$, $(h+k+l=1)$: Permessa (1° riflessione)
   - $\big(1\quad 1\quad 0\big)$, $(h+k+l=2)$: *Estinta*
   - $\big(1\quad 1\quad 1\big)$, $(h+k+l=3)$: **Permessa** (2° riflessione)

La seconda riflessione è associata a $\vec{G}_{111}$ (con $|\vec{G}_{111}| = \frac{2\pi\sqrt{3}}{a}$), con

$$|\vec{G}_{111}| = \frac{4\pi}{\lambda} \sin\left(\frac{\theta^{(2)}}{2}\right) \Rightarrow \frac{2\pi\sqrt{3}}{a} = \frac{4\pi}{\lambda} \sin\left(\frac{\theta^{(2)}}{2}\right) .$$

Risolviamo per $\theta^{(2)}$:

$$\theta^{(2)} = 2 \arcsin\left(\frac{\lambda\sqrt{3}}{2a}\right) = 2 \arcsin\left(\frac{0{,}12\,\mathrm{nm} \cdot \sqrt{3}}{2 \cdot 0{,}277\,\mathrm{nm}}\right) \approx 44{,}1^\circ .$$

4. Calcoliamo la densità:

$$\rho = \frac{m_{\text{cella}}}{a^3} = \frac{120\ \text{u.m.a.}}{(0{,}277\,\mathrm{nm})^3} = \frac{120 \cdot 1{,}67 \times 10^{-27}\,\mathrm{kg}}{(0{,}277 \times 10^{-9}\ \mathrm{m})^3} \approx 9{,}43 \times 10^3\,\mathrm{kg/m}^3 .$$

Soluzione esercizio 2

1. La velocità del suono è

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

Per il modo longitudinale si ottiene

$$\omega_L \underset{q\to 0}{\sim} \frac{a}{2}\omega_0\, q + O(q^3)$$

$$v_L = \lim_{q\to 0} \frac{d\omega_L}{dq} = \frac{a}{2}\omega_0 = \frac{(3\times 10^{-10}\,\mathrm{m})\cdot(2{,}15\times 10^{12}\,\mathrm{s}^{-1})}{2} = 322{,}5\,\mathrm{m\,s^{-1}}\,.$$

Per i due modi trasversali degeneri risulta

$$\omega_T \underset{q\to 0}{\sim} \left[\frac{a}{2}+a\right]\omega_0\, q + O(q^3) = 3\frac{a}{2}\omega_0\, q + O(q^3)$$

$$\Rightarrow v_T = \lim_{q\to 0} \frac{d\omega_T}{dq} = \frac{3}{2}a\omega_0 = \frac{3\cdot(3\times 10^{-10}\,\mathrm{m})\cdot(2{,}15\times 10^{12}\,\mathrm{s}^{-1})}{2} = 967{,}5\,\mathrm{m\,s^{-1}}\,.$$

2. Un reticolo *fcc* ha 4 atomi per cella primitiva

$$n = \frac{N}{V} = \frac{4}{a^3} = \frac{4}{(3\times 10^{-10}\,\mathrm{m})^3} \approx 1{,}481\times 10^{29}\,\mathrm{m^{-3}}\,.$$

Calcoliamo il vettore d'onda di Debye k_D:

$$k_D = \left[6\pi^2 n\right]^{1/3} = \left[6\pi^2\cdot 1{,}481\times 10^{29}\,\mathrm{m^{-3}}\right]^{1/3} \approx 2{,}062\times 10^{10}\,\mathrm{m^{-1}}$$

Calcoliamo le Θ_D per i due rami usando le rispettive velocità del suono.

- **Temperatura di Debye Longitudinale ($\Theta_{D,L}$)**

$$\omega_{D,L} = v_L k_D = (322{,}5\,\mathrm{m\,s^{-1}})\cdot(2{,}062\times 10^{10}\,\mathrm{m^{-1}}) \approx 6{,}650\times 10^{12}\,\mathrm{rad/s}$$

$$\Theta_{D,L} = \frac{\hbar\omega_{D,L}}{k_B} = \frac{(1{,}054\times 10^{-34}\,\mathrm{J\,s})\cdot(6{,}650\times 10^{12}\,\mathrm{s^{-1}})}{1{,}38\times 10^{-23}\,\mathrm{J\,K^{-1}}} \approx 50{,}7\,\mathrm{K}$$

- **Temperatura di Debye Trasversale ($\Theta_{D,T}$)**

$$\omega_{D,T} = v_T k_D = (967{,}5\,\mathrm{m\,s^{-1}})\cdot(2{,}062\times 10^{10}\,\mathrm{m^{-1}}) \approx 19{,}95\times 10^{12}\,\mathrm{rad/s}$$

$$\Theta_{D,T} = \frac{\hbar\omega_{D,T}}{k_B} = \frac{(1{,}054\times 10^{-34}\,\mathrm{J\,s})\cdot(19{,}95\times 10^{12}\,\mathrm{s^{-1}})}{1{,}38\times 10^{-23}\,\mathrm{J\,K^{-1}}} \approx 152\,\mathrm{K}$$

3. **Capacità termica per unità di volume** La C_V totale per unità di volume è la somma del contributo del singolo ramo longitudinale ($C_{V,L}$) e dei due rami trasversali ($C_{V,T}$).

$$C_V = C_{V,L} + C_{V,T}$$

- **Caso $T = 8\,\mathrm{K}$ (Limite Basse Temperature):** Poiché per $T = 8\,\mathrm{K}$ risulta $T \ll \Theta_{D,L}$ e $T \ll \Theta_{D,T}$, siamo nel regime T^3 di Debye. Scomponiamo

$$C_V = \frac{4}{5}\pi^4 n k_B T^3 \left[\underbrace{\left(\frac{1}{\Theta_{D,L}}\right)^3}_{\text{1 modo L}} + \underbrace{2\left(\frac{1}{\Theta_{D,T}}\right)^3}_{\text{2 modi T}}\right] =$$

$$= \frac{4\pi^4(1{,}481\times 10^{29}\,\mathrm{m^{-3}})(1{,}38\times 10^{-23}\,\mathrm{J\,K^{-1}})(8\,\mathrm{K})^3}{5}\cdot\left[\frac{1}{(50{,}7\,\mathrm{K})^3} + \frac{2}{(152{,}2\,\mathrm{K})^3}\right] \approx$$

$$\approx 6{,}73\times 10^5\,\mathrm{J\,m^{-3}\,K^{-1}}$$

- **Caso $T = 600\,\mathrm{K}$ (Limite Alte Temperature):** Poiché per $T = 600\,\mathrm{K}$ vale $T \gg \Theta_{D,L}$ e $T \gg \Theta_{D,T}$, siamo nel limite classico di Dulong-Petit. Ogni modo (3 per atomo) contribuisce con k_B al calore specifico per atomo. La capacità termica per unità di volume è $C_V = 3nk_B$.

$$C_V = 3nk_B = 3 \cdot (1{,}481 \times 10^{29}\,\mathrm{m}^{-3}) \cdot (1{,}38 \times 10^{-23}\,\mathrm{J\,K}^{-1}) \approx 6{,}13 \times 10^{6}\,\mathrm{J\,m}^{-3}\,\mathrm{K}^{-1}$$

4. **Caso biatomico a $T = 600\,\mathrm{K}$:** Sempre nel limite di alta temperatura, vanno aggiunti $3N$ modi ottici

$$C_V(\text{biatomico}) = 6nk_B \approx 1{,}23 \times 10^{7}\,\mathrm{J\,m}^{-3}\,\mathrm{K}^{-1}\,.$$