

Esonero I Materia Condensata. AA 2019/2020
(15/11/2019)

1 Esercizio 1

Due cristalli monoatomici vengono studiati col metodo delle polveri con lunghezza d'onda della radiazione incidente $\lambda = 1 \text{ \AA}$. Il primo cristallo ha reticolo cristallino fcc (cubico a facce centrate), il secondo ha struttura del diamante quindi reticolo cristallino fcc con base costituita da due atomi: $\vec{d}_1 = (0, 0, 0)$, $\vec{d}_2 = \frac{a}{4}(1, 1, 1)$.

- Calcolare esplicitamente i vettori di reticolo reciproco (e rispettivi moduli) che corrispondono ai primi 3 picchi di diffrazione per i due cristalli. (8 punti - 4 per ogni cristallo)
- Calcolare i valori dei parametri reticolari a_1 e a_2 dei due cristalli se il terzo massimo di interferenza costruttiva si trova in corrispondenza degli angoli $\theta_1 = 70^\circ$ e $\theta_2 = 80^\circ$, rispettivamente. (3 punti)
- Determinare la densità atomica dei due cristalli. (3 punti)

2 Esercizio 2

Una catena lineare monoatomica è disposta e libera di muoversi lungo l'asse \hat{x} . Sia $M = 16$ u.m.a. la massa degli atomi nella catena e $\rho = 6.40$ u.m.a. \AA^{-1} la densità lineare di massa.

- Quante branche e di che tipo sono presenti? Quante sarebbero e di che tipo se la catena fosse libera di muoversi nel piano $\hat{x}\hat{y}$? (2 punti)
- Ricavare la relazione di dispersione in approssimazione armonica e per interazione a primi vicini. Determinare i valori a bordo e a centro zona e disegnare le curve di dispersione fononica nella Prima Zona di Brillouin. (4 punti)
- Se la velocità del suono è 1000m/s, determinare la costante di forza della catena. (3 punti)
- Determinare la capacità termica per unità di volume a $T_1 = 10 \text{ K}$, $T_2 = 700 \text{ K}$, giustificando la scelta dei modelli. (4 punti)

- Discutere come cambia la capacità termica per unità di volume a parità di costante reticolare se la catena è biatomica. (3 punti)

$$1 \text{ u.m.a.} = 1.67 \cdot 10^{-24} \text{g}, K_B = 1.38 \cdot 10^{-16} \text{ erg K}^{-1}, \hbar = 1.05 \cdot 10^{-27} \text{ erg s.}$$

3 Soluzioni

3.1 Esercizio 1

1. Il primo cristallo è un fcc semplice, dunque se lo descriviamo nella base di vettori primitivi troviamo che il fattore di struttura è sempre diverso da zero. Questo implica che i primi 3 picchi di diffrazione corrisponderanno, in ordine, ai 3 vettori più corti di reticolo reciproco. Il reticolo reciproco di un reticolo fcc è un bcc, e i vettori primitivi di reticolo reciproco sono:

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

I primi 3 vettori di reticolo reciproco sono i vettori che vanno dall'origine a: centro del cubo, lato del cubo e diagonale della faccia del cubo:

$$\begin{aligned}\vec{G}_1 &= \frac{2\pi}{a}(1, 1, 1) = \vec{g}_1 + \vec{g}_2 + \vec{g}_3 \\ \vec{G}_2 &= \frac{2\pi}{a}(2, 0, 0) = \vec{g}_2 + \vec{g}_3 \\ \vec{G}_3 &= \frac{2\pi}{a}(2, 2, 0) = \vec{g}_1 + \vec{g}_2 + 2\vec{g}_3\end{aligned}$$

Da cui si ottengono i rispettivi moduli:

$$\begin{aligned}|\vec{G}_1| &= \frac{2\pi}{a}\sqrt{3} \\ |\vec{G}_2| &= \frac{4\pi}{a} \\ |\vec{G}_3| &= \frac{4\pi}{a}\sqrt{2}\end{aligned}$$

Il secondo cristallo ha la struttura del diamante quindi $f_1 = f_2$. Poichè la base è costituita da due atomi occorre studiare le eventuali estinzioni che corrispondono a valori nulli del fattore di struttura del cristallo. Il fattore di struttura è definito come

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

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}_1 e \vec{d}_2 degli atomi di cui è costituita la base.

Dati i vettori di reticolo reciproco di un cristallo fcc, il generico vettore di reticolo reciproco del cristallo è $\vec{G} = \frac{2\pi}{a}(-h + k + l, h - k + l, h + k - l)$ e dunque $\vec{G} \cdot \vec{d}_2 = \frac{\pi}{2}(h + k + l)$.

Pertanto il fatto di struttura è:

$$F(\vec{G}) = N f(1 + \exp(-i \vec{G} \cdot \vec{d}_2)) = N f(1 + \exp(-i \frac{\pi}{2}(h + k + l))).$$

Il cristallo in esame è un fcc con base biatomica, quindi i tre vettori del reticolo reciproco più corti sono gli stessi che abbiamo determinato prima. Andando a sostituire gli indici dei vettori di reticolo reciproco nel fattore di struttura vediamo che questo è non nullo per i vettori \vec{G}_1 e \vec{G}_3 , mentre troviamo estinzione per il vettore \vec{G}_2 :

$$F(\vec{G}_1) = N f(1 + \exp(-i \frac{\pi}{2}3)) = N f(i + 1).$$

$$F(\vec{G}_2) = N f(1 + \exp(-i \frac{\pi}{2}2)) = 0.$$

$$F(\vec{G}_3) = N f(1 + \exp(-i \frac{\pi}{2}4)) = 2N f.$$

Poichè abbiamo trovato una estinzione, ci andiamo a determinare il quarto vettore più corto di reticolo reciproco che punta al centro del cubo non adiacente all'origine e ha fattore di struttura non nullo:

$$\vec{G}_4 = \frac{2\pi}{a}(3, 1, 1) = \vec{g}_1 + 2\vec{g}_2 + 2\vec{g}_3,$$

$$F(\vec{G}_4) = N f(1 + \exp(-i \frac{\pi}{2}5)) = N f(i - 1).$$

Pertanto per il secondo cristallo i primi 3 picchi di diffrazione corrispondono ai vettori di reticolo reciproco \vec{G}_1 , \vec{G}_3 e \vec{G}_4 , dove $|\vec{G}_4| = \frac{2\pi}{a}\sqrt{11}$.

2. Dalla condizione di Laue

$$|\vec{G}_i| = 2k \sin\left(\frac{\theta_i}{2}\right)$$

si ottiene per il primo cristallo:

$$|\vec{G}_3| = \frac{4\pi}{a_1} \sqrt{2} = \frac{4\pi}{\lambda} \sin\left(\frac{\theta_1}{2}\right) \quad \rightarrow \quad a_1 = \frac{\sqrt{2}\lambda}{\sin\left(\frac{\theta_1}{2}\right)} = 2.47 \text{ \AA}$$

per il secondo cristallo:

$$|\vec{G}_4| = \frac{2\pi}{a_2} \sqrt{11} = \frac{4\pi}{\lambda} \sin\left(\frac{\theta_2}{2}\right) \quad \rightarrow \quad a_2 = \frac{\sqrt{11}\lambda}{2 \sin\left(\frac{\theta_2}{2}\right)} = 2.58 \text{ \AA}$$

3. La densità atomica è data dal rapporto tra numero di atomi e il volume del cristallo. Nella cella convenzionale cubica del primo cristallo ci sono 8 atomi nei vertici del cubo (ognuno condivisi da 8 celle cubiche) e 6 nelle facce (ognuno condivisi da 2 celle cubiche), nel secondo cristallo 8 nei vertici, 6 nelle facce e 4 interni:

$$\rho_1 = \frac{8 \frac{1}{8} + 6 \frac{1}{2}}{a_1^3} = 2.7 \cdot 10^{23} \text{ Atomi/cm}^3,$$

$$\rho_2 = \frac{8 \frac{1}{8} + 6 \frac{1}{2} + 4}{a_2^3} = 4.6 \cdot 10^{22} \text{ Atomi/cm}^3.$$

3.2 Esercizio 2

1. Dato che la catena è lineare monoatomica e libera di muoversi in una sola dimensione, ci sarà solo una branca acustica longitudinale. Se la catena fosse libera di muoversi in due dimensioni ci sarebbero due branche acustiche: una longitudinale e una trasversale.
2. Per ricavare la relazione di dispersione scriviamo l'equazione del moto in approssimazione armonica e per interazione a primi vicini:

$$M\ddot{u}_n = -C(2u_n - u_{n+1} - u_{n-1}) \quad (1)$$

dove C è la costa di forza tra due atomi e M la massa degli atomi. La soluzione è un'onda piana della forma:

$$u_n = A \exp i(qna - \omega t) \quad (2)$$

sostituendo (2) nell'equazione (1) troviamo la relazione di dispersione:

$$\omega(q) = \sqrt{\frac{4C}{M}} \left| \sin\left(\frac{qa}{2}\right) \right| \quad (3)$$

a centro zona si ha

$$\omega(q)|_{q=0} = 0 \quad (4)$$

a bordo zona si ha

$$\omega(q)|_{q=\pm\frac{\pi}{a}} = \sqrt{\frac{4C}{M}} \left| \sin\left(\pm\frac{\pi}{2}\right) \right| = \sqrt{\frac{4C}{M}} \quad (5)$$

3. La velocità del suono si ottiene dall'andamento lineare della branca acustica a piccoli valori di q :

$$\omega(q \sim 0) \approx \sqrt{\frac{4C}{M}} \left(\frac{qa}{2}\right) = v_s q \quad \longrightarrow \quad v_s = \sqrt{\frac{C}{M}} a \quad (6)$$

e, di conseguenza,

$$C = \frac{M v_s^2}{a^2} = 4.3 \cdot 10^2 \text{ dyne/cm},$$

dove la costante reticolare a è stata calcolata tramite la densità lineare di massa ρ

$$\rho = \frac{M}{a} \quad \longrightarrow \quad a = \frac{M}{\rho} = 2.5 \text{ \AA}$$

4. Per determinare la capacità termica per unità di volume occorre innanzitutto calcolare la temperatura di Debye del sistema, θ_D , per studiare se esso si trova a basse o alte temperature rispetto ad θ_D .

Possiamo ricavare la θ_D dalle relazioni:

$$\hbar \omega_D = K_B \theta_D$$

e

$$\omega_D = v_s q_D,$$

dove q_D può essere ottenuto dalla approssimazione di Debye che eguaglia il volume della prima zona di Brillouin a quello di una sfera di raggio q_D . In una dimensione:

$$2q_D = \frac{2\pi}{a} \quad \longrightarrow \quad q_D = \frac{\pi}{a}.$$

Si ottiene quindi

$$\begin{aligned}\theta_D &= \frac{\hbar \omega_D}{K_B} = \frac{\hbar v_s q_D}{K_B} = \frac{\hbar v_s \pi}{K_B a} = \\ &= \frac{\pi \cdot 1.05 \cdot 10^{-27} \text{ erg s} \cdot 10^3 \text{ m/s}}{2.5 \cdot 10^{-10} \text{ m} \cdot 1.38 \cdot 10^{-16} \text{ erg K}^{-1}} v_s = 95.6 \text{ K}\end{aligned}$$

Dato che $T_1 \ll \theta_D$, la capacità termica per unità di volume può essere calcolata in approssimazione di Debye:

$$\frac{C_V(T_1)}{V} = \frac{4}{5} \pi^4 \frac{N}{V} K_B \left(\frac{T_1}{\theta_D} \right)^3, \quad (7)$$

dove N è il numero di atomi nella catena, quindi

$$\frac{N}{V} = \frac{1}{a} \quad (8)$$

Quindi avremo

$$\frac{C_V(T_1)}{V} = \frac{4 \cdot \pi^4 \cdot 1.38 \cdot 10^{-16} \text{ erg K}^{-1} \cdot 10^3 \text{ K}^3}{5 \cdot 2.5 \cdot 10^{-8} \text{ cm} \cdot (95.6)^3 \text{ K}^3} = 4.9 \cdot 10^{-10} \text{ erg K}^{-1} \text{ cm}^{-1}.$$

A T_2 si è in regime di alte temperature, quindi il contributo fononico alla capacità termica possono essere calcolato dalla legge di Dulong-Petit.

$$\frac{C_V(T_2)}{V} = \frac{N}{V} K_B = \frac{K_B}{a} = 0.55 \cdot 10^{-8} \text{ erg K}^{-1} \text{ cm}^{-1}.$$

5. Se la catena è biatomica oltre agli N modi acustici avremo N modi ottici. A bassa temperatura i modi acustici contribuiscono allo stesso modo che nella catena monoatomica, mentre i modi ottici possono essere trascurati perchè il loro contributo tende a zero secondo il modello di Einstein. Ad alta temperatura, assumendo che la Temperatura di Einstein sarà inferiore a T_2 , sia i modi ottici che quelli acustici saranno attivati e dunque la capacità termica per unità di volume a parità di costante reticolare raddoppierà.