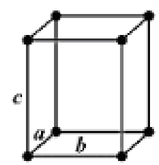
Fisica della Materia Condensata.
Prof. Paola Gallo.
Esonero - 11 Novembre 2022

1 Esercizio 1

Si abbia un cristallo con struttura ortorombica e base monoatomica. Siano $a = 1.7$Å, $b = 2.5$Å e $c = 3.3$Å i parametri reticolari.



1. Determinare i vettori primitivi di traslazione del reticolo reciproco. (3)
2. Studiare il fattore di struttura e le riflessioni permesse con relative intensità. (3)
3. Determinare l'angolo a cui si osserva il primo picco di diffrazione per raggi X di lunghezza d'onda $\lambda = 0.20$ nm. (3)
4. Calcolare il fattore di impacchettamento. (3)
5. Come cambia il fattore di struttura se il cristallo ha base biatomica e il secondo atomo si trova in d_2=1/2(b,a,c) . (3)

2 Esercizio 2

Un solido ha una struttura cubica semplice, con lato del cubo $a = 2\,Å$ e una base di 2 atomi per cella di masse M_1 e M_2. La massa dell'atomo più pesante è $M_1 = 5\ 10^{-23}$ g. Supponiamo che sia i modi ottici che quelli acustici siano triplamente degeneri e che il modo ottico sia abbia frequenza circa costante di 180 cm^{-1}, e che un esperimento fornisca i seguenti dati per il modo acustico triplamente degenere:

ω (rad/s)	2,4×10^8	3,6×10^8	5×10^8
k (cm^{-1})	1200	1800	2500

1. Determinare la velocità del suono nel solido. (3 punti)
2. Utilizzando le leggi di dispersione per una catena lineare biatomica, e data la costante elastica pari a C = 3240 dyne/cm, determinare il valore della frequenza acustica a bordo zona e la massa dell'atomo più leggero. (4 punti)
3. Determinare la temperatura di Debye del solido e la sua capacità termica per unità di massa a 100 K. (4 punti)
4. Determinare la capacità termica per unità di massa a 1000 K. (4 punti)

$K_B = 8.6167 \cdot 10^{-5}\,\mathrm{eV\,K^{-1}}$, $h = 4.136 \cdot 10^{-15}\,\mathrm{eV}$ s, 1 dyne = 10^{-5} N.

3 Soluzioni

3.1 Esercizio 1

1. I vettori primitivi del reticolo diretto sono

$$\vec{t}_1 = b\,\hat{x}$$
$$\vec{t}_2 = a\,\hat{y}$$
$$\vec{t}_3 = c\,\hat{z}$$

Dalla definizione di vettori del reticolo reciproco

$$\vec{g}_1 = 2\,\pi \frac{\vec{t}_2 \times \vec{t}_3}{\vec{t}_1 \cdot (\vec{t}_2 \times \vec{t}_3)}$$
$$\vec{g}_2 = 2\,\pi \frac{\vec{t}_3 \times \vec{t}_1}{\vec{t}_1 \cdot (\vec{t}_2 \times \vec{t}_3)}$$
$$\vec{g}_3 = 2\,\pi \frac{\vec{t}_1 \times \vec{t}_2}{\vec{t}_1 \cdot (\vec{t}_2 \times \vec{t}_3)}$$

si ottengono

$$\vec{g}_1 = \frac{2\,\pi}{b}\,\hat{x}$$
$$\vec{g}_2 = \frac{2\,\pi}{a}\,\hat{y}$$
$$\vec{g}_3 = \frac{2\,\pi}{c}\,\hat{z}$$

2. Il fattore di struttura di un cristallo 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 $\vec{d}_i$ vettore di base. In questo caso la base e monoatomica e si ha $\vec{d}_i = \vec{d}_1 = \vec{0}$. Di conseguenza

$$F(\vec{G}) = N\, f_1.$$

Sono permesse le riflessioni da tutti i piani e i picchi avranno tutti la stessa intensità.

3. Essendo tutte le riflessioni permesse, il primo picco è associato al vettore del reticolo reciproco più corto, cioè quello che congiunge due primi vicini. Si ha

$$\vec{G}_1 = \vec{g}_3.$$

Dalla condizione di Laue

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

si ottiene

$$|\vec{G}_1| = |\vec{g}_3| = \frac{2\,\pi}{c} = \frac{4\,\pi}{\lambda} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \qquad \longrightarrow \theta = 35.3^{\circ}.$$

4. Il fattore di impacchettamento è dato dal rapporto tra il volume occupato dagli atomi, considerati come sferici e di raggio massimo R_{max}, e il volume della cella. Data la particolare struttura del cristallo, R_{max} sarà la metà del lato più piccolo della cella del reticolo: $R_{max} = \frac{a}{2}$.

$$p.f. = \frac{8\, \frac{1}{8}\, \frac{4}{3}\, \pi R_{max}^3}{a\, b\, c} = 0.18.$$

5. Se il cristallo ha base biatomica con $\vec{d}_1$=(0,0,0) e $\vec{d}_2 = \vec{d}_2$=1/2(b,a,c) e i due atomi hanno lo stesso fattore di forma allora il fattore di struttura vale:

$$F(\vec{G}) = N f (1 + \exp\left(-i\, \pi (h + k + l)\right)).$$

Quindi sono permesse le riflessioni da tutti i piani con h+k+l=2n (ossia numero pari), mentre la riflessione è nulla per h+k+l=2n+1 (numero dispari).

3.2 Esercizio 2

1. Poichè la relazione di dispersione è lineare per i primi 3 dati, essi si riferiscono alla zona a piccoli k della branca acustica triplamente. Dai primi tre dati otteniamo:

$$\omega(k) = 2 \cdot 10^5 k = v_s\, k, \tag{1}$$

di conseguenza $v_s = 2 \cdot 10^5$ cm/s.

2. Il valore della frequenza acustica a bordo zona $\omega(\pi/a)$ con $k = \pi/a$, si ricava dalla costante C:

$$\omega(\pi/a) = \sqrt{\frac{2C}{M_1}} = 1.14 \cdot 10^{13} rad/s. \tag{2}$$

La massa M_2 si ricava dal valore della frequenza del modo ottico:

$$\omega_O = 2\pi c \cdot 180 cm^{-1} = \sqrt{2C(1/M1 + 1/M2)}, \tag{3}$$

da cui $M_2 = 6.36\ 10^{-24}$ g.

3. Calcolando la temperatura di Debye e di Einsten possiamo decidere in che regime di temperature ci si trova e quale modello utilizzare.
In tre dimensioni vale la relazione

$$q_D = \frac{(6\pi^2)^{1/3}}{a}$$

Sfruttando poi le relazioni

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

e

$$\omega_D = v_s\, q_D,$$

si ha

$$T_D = \frac{\hbar\, \omega_D}{K_B} = \frac{\hbar\, v_s\, q_D}{K_B} = 298K$$

La temperatura di Debye risulta maggiore di 100K per cui utilizzando il modello di Debye per il calore specifico si avrà:

$$\frac{C_V^D(10K)}{M} = \frac{12}{5}\pi^4 \frac{N}{M} K_B \left(\frac{T}{T_D}\right)^3 = \frac{12}{5}\pi^4 \frac{1}{M_1 + M_2} K_B \left(\frac{T}{T_D}\right)^3 = 2.16 \mathrm{J\,K^{-1}\,g^{-1}}.$$

La temperatura di Einstein ottenuta dal modo ottico risulta pari a 259 K, anche essa maggiore di 100K, il contributo sarà probabilmente trascurabile, lo possiamo stiamare utilizzando il modello di Einsten:

$$\frac{C_V^E(10K)}{M} = 3\frac{N}{M}K_B\left(\frac{T_E}{T}\right)^2 \frac{\exp\left(\frac{T_E}{T}\right)}{\left(\exp\left(\frac{T_E}{T}\right)-1\right)^2} = 0.43\mathrm{J\,K^{-1}\,g^{-1}}.$$

Il risultato, per un totale di 2.59 J/Kg, conferma che il contributo di Einsten potrebbe essere trascurato.

4. La temperatura di 1000 K risulta maggiore sia di quella di Debye che di quella di Einstein, quindi a questa alta T possiamo usare la legge di Dulong-Petit, ossia il limite classico con 6 gradi di libertà:

$$\frac{C_V^{TOT}(750K)}{M} = \frac{6NK_B}{M} = 1.47\,\mathrm{J\,K^{-1}\,g^{-1}}.$$