Fononi e calori reticolari - Soluzioni degli esercizi

Fisica della Materia Condensata

Dipartimento di Matematica e Fisica
Università degli Studi Roma Tre

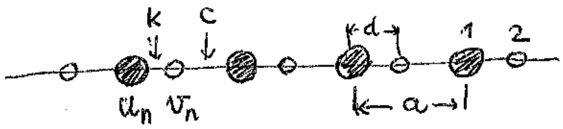
A.A. 2016/2017

Fononi e calori reticolari

CATENE LINEARI / FONONI / C_V

ESERCIZIO 1 catena lineare asimmetrica

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 dipendono 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 ($q=\pi/a$).



Soluzione

u_n è la coordinata dell'atomo 1, v_n dell'atomo 2.
Se consideriamo solo l'interazione a primi vicini le eq. del moto sono:

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

cerchiamo soluzioni del tipo:

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

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

Sostituendo queste in $(*)$ otteniamo:

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

Moltiplichiamo la seconda eq per e^{-iqd}

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

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

imponiamo che il determinante dei coeff. di A_1 e A_2 sia nullo:

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

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

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

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

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

$$= \frac{(c+k)}{M} \pm \frac{1}{M}\sqrt{c^2 + k^2 + 2ck\cos(qa)} \quad \leftarrow \text{LEGGE di DISPERSIONE}$$

$\boxed{q=0}$ $\quad \omega^2 = \frac{c+k}{M} \pm \frac{c+k}{M}$

$$\begin{cases} \omega_-^2 = 0 & \text{~~banda~~ branca acustica} \\ \omega_+^2 = \frac{2(c+k)}{M} & \text{branca ottica} \end{cases}$$

inoltre $\quad \frac{u_n}{v_n} = \frac{A_1}{A_2 e^{iqd}} = \left.\frac{k + c e^{-iqa}}{-M\omega^2 + k + c}\right|_{q=0} = \begin{cases} 1 & \text{acustica} \\ -1 & \text{ottica} \end{cases}$ $\rightarrow$

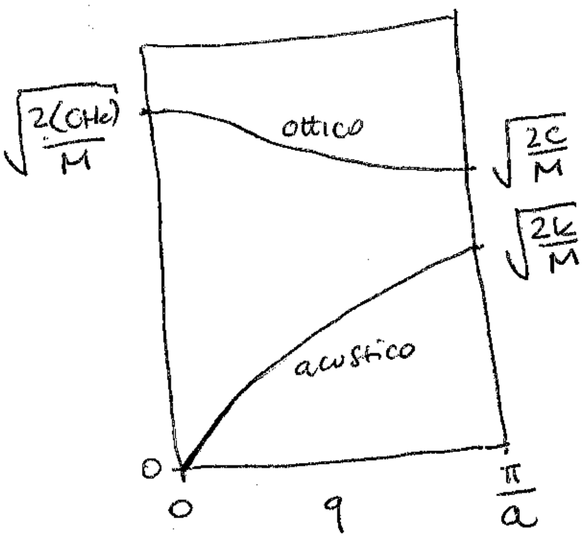
che ci dice che nella banda acustica i due ioni si muovono in fase e con la stessa ampiezza ($A_1 = A_2$), mentre nella banda ottica sono sfasati di π, cioè si muovono in direzioni opposte ($A_1 = -A_2$) ma a "centro di massa della cella" fisso. In entrambi i casi il moto di ogni cella primitiva è identico.

$\boxed{q = \frac{\pi}{a}}$ $\quad \omega^2 = \frac{C+K}{M} \pm \frac{C-K}{M}$

$$\begin{cases} \omega_-^2(\pi/a) = \frac{2K}{M} & \text{branca acustica} \\ \omega_+^2(\pi/a) = \frac{2C}{M} & \text{branca ottica} \end{cases} \qquad \boxed{\text{per } K<C} \; !!$$

Se $K > C$, ω_- è ottica e ω_+ è acustica.

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



$K < C$

ESERCIZIO 2

In una catena lineare di passo $a = 2.5\,\mathring{A}$ la velocità del suono per un'onda logitudinale è 10^5 cm/s. Calcolare:

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

Soluzione

1) La relazione di dispersione in una catena lineare monoatomica è data da:

$$\omega = 2\sqrt{\frac{C}{M}}\left|\sin\left(\frac{qa}{2}\right)\right| \quad (1)$$

la (1) per $\lambda \gg a$ ($\sim$ centro zona $q=0$) diventa:

$$\omega = \sqrt{\frac{C}{M}}\, a q = v_s q \qquad v_s: \text{velocità del suono} \quad \left(v_s = \sqrt{\frac{C}{M}}\, a\right)$$

per cui: $\sqrt{\frac{C}{M}} = \frac{v_s}{a}$ sostituisco nella (1):

$$\omega = 2\frac{v_s}{a}\left|\sin\left(\frac{qa}{2}\right)\right|$$

per un'onda sonora di $\lambda = 20\,\mathring{A}$: $q = \frac{2\pi}{\lambda}$

$$\omega = 2\frac{v_s}{a}\left|\sin\left(\pi\frac{a}{\lambda}\right)\right| = \frac{2\cdot 10^5\ \text{cm/s}}{2.5\cdot 10^{-8}\ \text{cm}}\left|\sin\left(\frac{\pi\cdot 2.5\,\mathring{A}}{20\,\mathring{A}}\right)\right| = 3{,}06\cdot 10^{12}\ \frac{\text{rad}}{\text{s}}$$

2) In 1D, ~~un~~ nel modello di Debye ($\omega = v_s q$) la densità degli stati $D(\omega)$ è uniforme:

$$N = \int_0^{\omega_D} \frac{dN}{d\omega}\, d\omega = \int_0^{\omega_D} \frac{dN}{dq}\frac{dq}{d\omega}\, d\omega = \int_0^{\omega_D} D(\omega)\, d\omega \quad \rightarrow D(\omega) = \frac{dN}{dq}\frac{dq}{d\omega}$$

$$\left(\frac{dN}{dq}\right)_{1D} = 2\frac{L}{2\pi} = \frac{L}{\pi} \qquad \left.\frac{d\omega}{dq}\right|_{Debye} = \frac{d}{dq}(v_s q) = v_s \qquad \text{sostituendo:}$$

$$\boxed{D_{1D}(\omega) = \frac{L}{2\pi}\frac{1}{v_s}}$$

L è ~~la~~ lunghezza della catena: $L = Na$

→

(Vedi NOTA DOPO L'ESERCIZIO)

troviamo ω_D e Θ_D:

$$N = \int_0^{\omega_D} D_{1D}(\omega)\, d\omega = \int_0^{\omega_D} \frac{Na}{\pi} \frac{1}{v_s}\, d\omega = \frac{Na}{\pi} \frac{\omega_D}{v_s}$$

$$\boxed{\omega_D = \frac{\pi}{a} v_s} \quad 1D$$

$$k_B \Theta_D = \hbar \omega_D$$

$$\Theta_D = \frac{\hbar \omega_D}{k_B} = \frac{\pi v_s \hbar}{k_B} = \frac{\pi \cdot 10^5 \cdot 1{,}05 \cdot 10^{-27}}{2.5 \cdot 10^{-8} \cdot 1{,}38 \cdot 10^{-16}} K = 95.5\ K$$

3) Poichè $T \gg \Theta_D$, vale l'approssimazione classica (per un grado di libertà) per l'energia interna:

$$U = N k_B T$$

$$u = \frac{U}{L} = \frac{N}{L} k_B T = \frac{1}{a} k_B T$$

$$u(600K) = \frac{1.38 \cdot 10^{-16}\ erg\, K^{-1} \cdot 600K}{2.5 \cdot 10^{-8}\ cm} = 3.3 \cdot 10^{-6} \frac{erg}{cm}$$

DENSITÀ DEGLI STATI FONONICI - MOD. DEBYE

- dispersione del modo : $\omega(q) = v q$
- Ogni valore di $\vec{q}$, cioè ogni stato (modo), occupa nello spazio reciproco un volumetto:

$$\left(\frac{2\pi}{L}\right)^D$$

D: dimensione (1,2,3)
L: dimensione lineare del campione

- Il numero di stati permessi con $|\vec{q}| < \bar{q}$ è $N(\bar{q})$:

$$N(\bar{q}) = \frac{\text{volume che occupano gli stati con } |\vec{q}| < \bar{q}}{\text{volume che occupa uno stato}}$$

- La densità degli stati in frequenza è $D(\omega)$.

$\boxed{1D}$

$$N_{1D}(q) = \frac{2q}{\frac{2\pi}{L}} = \frac{L}{\pi} q$$

L: lunghezza del campione

$$D_{1D}(\omega) = \frac{dN_{1D}}{d\omega} = \frac{dN_{1D}}{dq}\frac{dq}{d\omega} = \frac{L}{\pi}\frac{1}{v}$$

$\boxed{2D}$

$$N_{2D}(q) = \frac{\pi q^2}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2} = \frac{L^2}{4\pi} q^2 = \frac{A}{4\pi} q^2$$

A: area del campione

$$D_{2D}(\omega) = \frac{dN_{2D}}{d\omega} = \frac{dN_{2D}}{dq}\frac{dq}{d\omega} = \frac{L^2}{2\pi} q \frac{1}{v} = \frac{L^2}{2\pi}\frac{\omega}{v^2}$$

$\boxed{3D}$

$$N_{3D}(q) = \frac{\frac{4}{3}\pi q^3}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3} = \frac{L^3}{6\pi^2} q^3 = \frac{V}{6\pi^2} q^3$$

V: volume del campione

$$D_{3D}(\omega) = \frac{dN_{3D}}{d\omega} = \frac{dN_{3D}}{dq}\frac{dq}{d\omega} = \frac{3V}{6\pi^2} q^2 \frac{1}{v} = \frac{V}{2\pi^2}\frac{\omega^2}{v^3}$$

ESERCIZIO 3

Gli atomi di una catena lineare monoatomica ($M = 15$ uma) disposta lungo l'asse $\hat{x}$ possono muoversi nel piano xy sotto l'effetto di un potenziale elastico del tipo:

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

dove $\alpha = 2\beta = 1.56 \cdot 10^4$ dyne/cm, n' scorre sugli atomi.

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 bordo zona

Soluzioni

Scriviamo l'espressione della forza agente sull'n-simo atomo lungo $\hat{x}$ (F_x^n) e lungo $\hat{y}$ (F_y^n):

- $$F_x^n = -\frac{\partial V}{\partial u_x^n} = -\sum_{n'} \alpha \left(u_x^{n'} - u_x^{n'+1} \right) \left(\delta_{n',n} - \delta_{n'+1,n} \right) =$$

$$= -\left\{ \alpha \left(u_x^n - u_x^{n+1} \right) - \left(u_x^{n-1} - u_x^n \right) \alpha \right\} =$$

$$= -\alpha \left[\left(u_x^n - u_x^{n+1} \right) + \left(u_x^n - u_x^{n-1} \right) \right]$$

- $$F_y^n = -\frac{\partial V}{\partial u_y^n} = -\sum_{n'} \beta \left(u_y^{n'} - u_y^{n'+1} \right) \left(\delta_{n',n} - \delta_{n'+1,n} \right) =$$

$$= -\beta \left[\left(u_y^n - u_y^{n+1} \right) + \left(u_y^n - u_y^{n-1} \right) \right]$$

Scriviamo le eq. del moto:

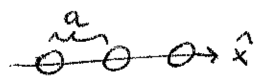
$$F_\alpha^n = M \ddot{u}_\alpha^n \qquad \alpha = x, y$$

$$\begin{cases} M \ddot{u}_x^n = \alpha \left(u_x^{n-1} - 2 u_x^n + u_x^{n+1} \right) \\ M \ddot{u}_y^n = \beta \left(u_y^{n-1} - 2 u_y^n + u_y^{n+1} \right) \end{cases}$$

prendiamo come forma per le soluzioni:

$$\begin{cases} u_x^n = A_x \, e^{i(qna - \omega_L t)} \\ u_y^n = A_y \, e^{i(qna - \omega_T t)} \end{cases}$$

a : spaziatura



ω_L : freq. longitudinale

ω_T : freq trasversale $\downarrow$ perché è quella del modo lungo $\hat{y}$ (la catena è lungo $\hat{x}$)

sostituendo queste funzioni di prova nelle eq. del moto otteniamo:

$$\begin{cases} -M\omega_L^2 = \alpha \left(e^{-iqa} - 2 + e^{iqa} \right) = 2\alpha \left(\cos(qa) - 1 \right) = -4\alpha \, \mathrm{sen}^2\left(\frac{qa}{2}\right) \\ -M\omega_T^2 = \beta \left(e^{-iqa} - 2 + e^{iqa} \right) = 2\beta \left(\cos(qa) - 1 \right) = -4\beta \, \mathrm{sen}^2\left(\frac{qa}{2}\right) \end{cases}$$

dalle quali troviamo le due frequenze normali:

$$\omega_L^2 = \frac{4\alpha}{M} \mathrm{sen}\left(\frac{qa}{2}\right) \quad \rightarrow \quad \omega_L = \sqrt{\frac{4\alpha}{M}} \left| \mathrm{sen}\left(\frac{qa}{2}\right) \right|$$

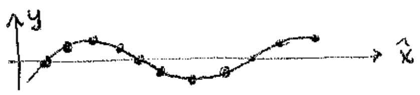
$$\omega_T^2 = \frac{4\beta}{M} \mathrm{sen}\left(\frac{qa}{2}\right) \quad \rightarrow \quad \omega_T = \sqrt{\frac{4\beta}{M}} \left| \mathrm{sen}\left(\frac{qa}{2}\right) \right|$$

2) A bordo zona $q = \frac{\pi}{a}$ si ha:

$$\omega_L\left(\frac{\pi}{a}\right) = \sqrt{\frac{4\alpha}{M}} \left| \sin(\pi/2) \right| = \sqrt{\frac{4\alpha}{M}}$$

$$\omega_T\left(\frac{\pi}{a}\right) = \sqrt{\frac{4\beta}{M}} \left| \sin(\pi/2) \right| = \sqrt{\frac{4\beta}{M}}$$

I due modi sono acustici (la catena è monoatomica) e si indicano con LA (longitudinale) e TA (trasversale)

TA 

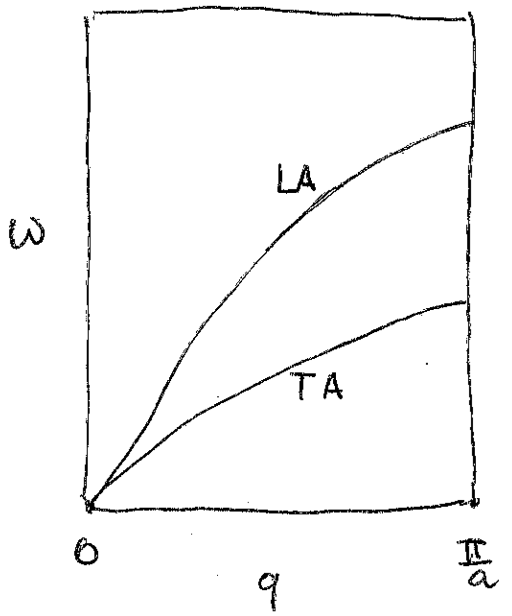
$\updownarrow u_y^n$ (nell' LA $u_x^n \parallel \hat{x}$)

calcoliamo i valori numerici:

$$\begin{cases} 1 \text{ dyne} = \dfrac{1 g \cdot 1 cm}{s^2} \\ 1 \text{ uma} = 1.66 \cdot 10^{-24} g \end{cases}$$

$$\omega_L\left(\frac{\pi}{a}\right) = \left(\frac{4 \cdot 1.66 \cdot 10^{4} \text{ dyne/cm}}{16 \cdot 1.66 \cdot 10^{-24} g}\right)^{1/2} = 5 \cdot 10^{13} \text{ rad/s}$$

$$\omega_T\left(\frac{\pi}{a}\right) = \left(\frac{4 \cdot 0.5 \cdot 1.66 \cdot 10^{4} \text{ dyne/cm}}{16 \cdot 1.66 \cdot 10^{-24} g}\right)^{1/2} = 3.54 \cdot 10^{13} \text{ rad/s}$$



$\omega_L > \omega_T$

ESERCIZIO 4

Un cristallo con reticolo SC ha paremetro reticolare $a = 1.5\ \text{Å}$ e una temperatura di Debye $\Theta_D = 150k$.

1) Calcolare il calore specifico c_V a $T = 30k$ e a $T = 700k$
2) Ricalcolare il punto 1 nel caso il cristallo abbia 2 atomi per cella

Soluzione

Capacità Termica $\quad C_V = \frac{\partial U}{\partial T}$

calore specifico $\quad c_V = \frac{1}{V}\frac{\partial U}{\partial T} = \frac{C_V}{V}$

(1) a $T = 30\,k$, $T \ll \Theta_D$ quindi usiamo l'espressione della capacità termica del modello di Debye:

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

~~il reticolo SC ha 1 atomo per cella~~ : $\cancel{n = \ldots}$

$$\cancel{C_V(30k) = \frac{12}{5}\pi^4 \frac{k_B}{a^3}\left(\frac{30k}{150k}\right)^3 = \frac{12}{5}\pi^4 \frac{1.38\cdot10^{-23}}{(1.5)^3}\left(\frac{1}{5}\right)^3}$$

il calore specifico :

$$c_V(T) = \frac{12}{5}\pi^4 \frac{N}{V} k_B\left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3 = \frac{12}{5}\pi^4 \overset{\text{densità atomica}}{n}\, k_B\left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3$$

nell' SC : $\quad n = \frac{N}{V} = \frac{1}{a^3} \quad$ (SC ha un atomo per cella)

$$c_V(30k) = \frac{12}{5}\pi^4 \frac{k_B}{a^3}\left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3 = \frac{12}{5}\pi^4 \frac{1.38\cdot10^{-23}\,J\,K^{-1}}{(1.5)^3\cdot10^{-24}\,cm^3}\left(\frac{30\,k}{150\,k}\right)^3 = 7.65\ \frac{J}{K\,cm^3}$$

Ad alte temperature vale l'approssimazione classica (Dulong & Petit):

$$c_V(T) = 3\,n\,k_B = 3\cdot 1.38\cdot10^{-23}\,J\,K^{-1}\cdot(1.5\cdot10^{-8}\,cm)^{-3} = 12.27\ J/K\cdot cm^3$$

② Quando aggiungo un atomo ~~alla base~~ alla base del reticolo ho 3N modi acustici e $3N(p-1) = 3N$ ottici (p: atomi di base, ora $p=2$).

Pertanto ad alta temperatura tutti i modi contribuiscono a C_V e avrò $3N + 3N = 6N$ modi, cioè il doppio di quando ho un solo atomo di base, per cui il C_V raddoppia.

A bassa temperatura 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 vari modi:

1) con il modello di Einstein prendendo il limite di basse temperature

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

2) si trascurano perché il loro contributo tende a zero per $T \to 0$

Per ~~conoscere~~ usare il metodo 1) dobbiamo conoscere ω_E, che è la frequenza ottica. Nei dati non c'è, quindi dobbiamo pensare che il contributo dei modi ottici sia trascurabile, e dunque a bassa T il C_V rimane lo stesso.

3) In realtà c'è anche un'altra approssimazione che consiste nel dire che i modi ottici contribuiscono come gli acustici con dispersione lineare e quindi il C_V raddoppia.
Questa è comunque una pessima approssimazione.

ESERCIZIO 5

(1) $$N = \frac{\frac{4}{3}\pi q_D^3}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3} \rightarrow q_D = \sqrt[3]{6\pi^2 n}$$

$$\hbar v_S q_D = \hbar\omega_D = k_B\Theta_D \qquad k_B\Theta_D = 3.5906\cdot 10^{-21}\,J \qquad \Theta_D = 260\,K$$

$$q_D = \frac{k_B\Theta_D}{\hbar v_S} \Rightarrow \sqrt[3]{6\pi^2 n} = \frac{k_B\Theta_D}{\hbar v_S}$$

per FCC : $n = \frac{4}{a^3} = \frac{4}{a_0^3(1+\alpha T)^3}$

$$1+\alpha T = \left[\frac{4}{a_0^3}\,6\pi^2\left(\frac{\hbar v_S}{k_B\Theta_D}\right)^3\right]^{\frac{1}{3}} = \frac{(24\pi^2)^{1/3}}{a_0}\frac{\hbar v_S}{k_B\Theta_D}$$

$$\alpha = \frac{1}{T}\left[\frac{(24\pi^2)^{1/3}}{a_0}\frac{\hbar v_S}{k_B\Theta_D} - 1\right]$$

per $T = 150\,K$ conosco v_S, quindi sostituendo si trova : $\alpha = 2.29\cdot 10^{-5}\,K^{-1}$

(2) Visto che abbiamo un parametro reticolare che varia con la temperatura, dobbiamo tenerne conto nel valutare c_V (perché entra nella densità n):

$$c_V(50) = \frac{12}{5}\pi^4\left(\frac{50\,K}{\Theta_D}\right)^3\frac{4}{a_0(1+\alpha\cdot 50K)}K_B = 3.516\cdot 10^5\,JK^{-1}m^{-3}$$

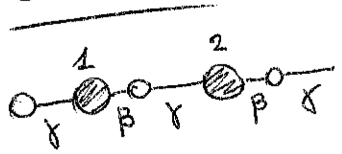
$$c_V(500) = 3nk_B = 3\cdot\frac{4}{a_0(1+\alpha\cdot 500K)}k_B = 6.156\cdot 10^5\,JK^{-1}m^{-3}$$

Esercizio 6

Una catena lineare biatomica ha passo reticolare $a = 3\,\text{Å}$. Sapendo che nella cella primitiva gli atomi sono individuati da $d_1 = (0)$ e $d_2 = \frac{a}{3}$, che gli atomi hanno massa uguale ($M = 21$ u.m.a) e che le costanti di forza $\beta = 5$ N/m quando la separazione tra gli atomi è $\frac{a}{3}$ e $\gamma = 1$ N/m quando vale $\frac{2}{3}a$

1) Trovare i moti ionici a $q \to 0$
2) Determinare v_S, K_D e Θ_D

Soluzione



Questa catena lineare asimmetrica l'abbiamo studiata nell'es 1

la legge di dispersione dei modi è:

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

per determinare v_S ci serve il modo acustico a $q \sim 0$; facciamo lo sviluppo:

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

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

$(1+x)^\alpha \sim 1+\alpha x$ per $x \to 0$

$$\sim (\beta+\gamma)\left(1-\frac{1}{2}\frac{\beta\gamma}{(\beta+\gamma)^2}a^2q^2\right)$$

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

prendiamo l'acustico (quello con segno meno),

$$\omega^2_{AC}(q\sim 0) = \frac{1}{2M}\frac{\beta\gamma}{\beta+\gamma}a^2q^2 \quad \rightarrow \quad \omega_{AC}(\sim 0) = \sqrt{\frac{\beta\gamma}{2(\beta+\gamma)M}}\,a\,q$$

$\omega_{AC}(\sim 0) = v_S\, q$

$$\Rightarrow \quad v_S = \sqrt{\frac{\beta\gamma}{2M(\beta+\gamma)}}\; a = \sqrt{\frac{5\ kg/s^2}{2\cdot 21\cdot 1.66\cdot 10^{-27}\cdot 6\ kg}}\; 3\cdot 10^{-10}\ m =$$

$$= 1037\ m/s$$

per q_D:
$$\frac{2q_D}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)} = N \qquad q_D = \pi\frac{N}{L} = \pi\frac{N}{Na} = \frac{\pi}{a}$$

OVVIAMENTE ...
(non approssimo in 1D!)

$$\omega_D = v_S\, q_D$$

$$q_D = 1.05\ \mathring{A}^{-1}$$

$$\omega_D = 1037\ \frac{m}{s}\cdot 1{,}05\cdot 10^{10}\ m^{-1} = 1.08\cdot 10^{13}\ \frac{rad}{s}$$

$$\theta_D = \frac{\hbar}{k_B}\,\omega_D = \frac{1.054\cdot 10^{-34}\ J\cdot s}{1.38\cdot 10^{-23}\ J\cdot K^{-1}}\; 1.08\cdot 10^{13}\ \frac{rad}{s} = 82.5\ K$$

ESERCIZIO 7

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

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

$$\hbar\omega_{OT} = 7.5\cdot 10^{-2}\,eV$$

(1) Determinare v_S, θ_D e θ_E

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

Soluzione

(1) $\omega_{AC} \sim v_S\, q$ per q piccoli e $v_S = \left.\frac{\partial\omega}{\partial q}\right|_{q=0}$

$$\frac{\partial\omega_{AC}}{\partial q} = \left(\frac{8\cdot 10^{-3}\,eV}{\hbar}\right)\frac{a}{2}\cos\left(\frac{qa}{2}\right) \qquad v_S = \left.\frac{\partial\omega_{AC}}{\partial q}\right|_{=0} = \frac{8\cdot 10^{-3}\,eV}{\hbar}\,\frac{a}{2}$$

$$v_S = \frac{8\cdot 10^{-3}\,eV\cdot 4\cdot 10^{-10}\,m}{2\cdot 6.58\cdot 10^{-16}\,eV\,s} = 2508\ m/s$$

$$K_B\theta_D = \hbar\omega_D = \hbar v_S q_D \quad\rightarrow\quad \theta_D = \frac{\hbar v_S}{K_B}\,q_D$$

$$N = \int_0^{\omega_D} D_{3D}(\omega)\,d\omega = \frac{V}{2\pi^2}\frac{1}{v_S^3}\int_0^{\omega_D}\omega^2\,d\omega = \frac{V}{2\pi^2}\frac{1}{v_S^3}\frac{1}{3}\omega_D^3$$

$$\frac{N}{V} = n = \frac{1}{a^3} \qquad 6\pi^2 n v_S^3 = \omega_D^3 = (v_S q_D)^3 \Rightarrow q_D = \sqrt[3]{6\pi^2 n} = \frac{\sqrt[3]{6\pi^2}}{a}$$

$$\theta_D = \frac{\hbar v_S}{K_B}\,q_D = \frac{1.054\cdot 10^{-34}\,J\,s\cdot 2508\,m/s}{1.38\cdot 10^{-23}\,J/K^{-1}}\,\frac{\sqrt[3]{6\pi^2}}{4\cdot 10^{-10}\,m} = 187\ K$$

θ_E si stima dai modi ottici (costanti in q in questo caso...)

$$\theta_E = \frac{\hbar\omega_E}{K_B} = \frac{\hbar\omega_{OT}}{K_B} = \frac{7.5\cdot 10^{-2}\,eV}{8.62\cdot 10^{-5}\,eV/K} = 870\ K$$

$\longrightarrow$

(2) Valutiamo il c_V:

3N modi acustici → Mod. Debye

3N modi ottici → Mod. Einstein

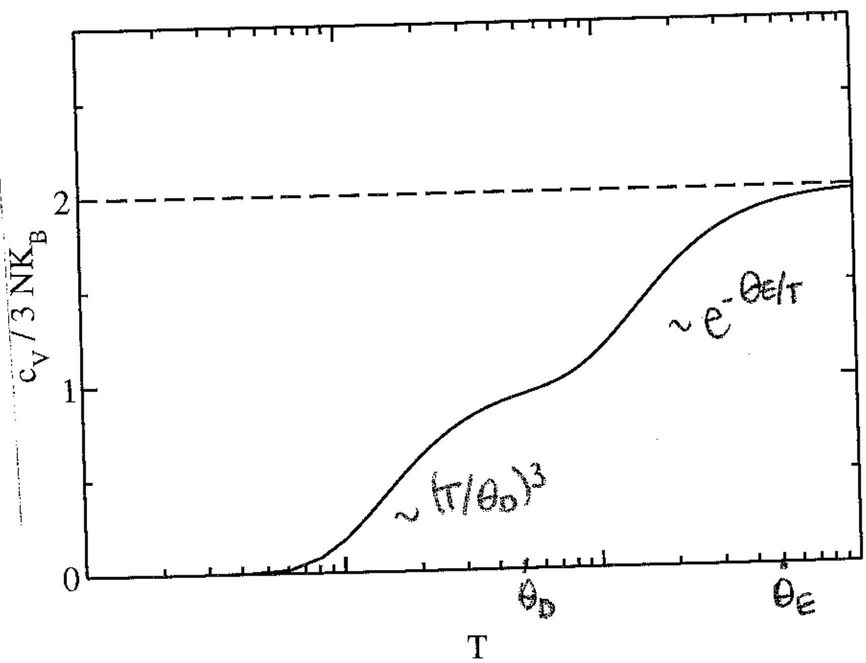
$$C_V^{TOT} = C_V^{Debye} + C_V^{Einstein}$$

a bassa T:

$$C_V^{TOT} = \frac{12}{5}\pi^4 N k_B \left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3 + 3N k_B \underbrace{\left(\frac{\Theta_E}{T}\right)^2 \frac{e^{\Theta_E/T}}{(e^{\Theta_E/T}-1)^2}}_{\sim e^{-\Theta_E/T}}$$

Ad alta T:

$$C_V^{TOT} = 3Nk_B + 3Nk_B = 6Nk_B$$



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).

Soluzione

Per l' FCC, considerando la cella cubica: $n = \frac{N}{V} = \frac{4}{a^3}$

$$q_D = \sqrt[3]{6\pi^2 n} = \frac{\sqrt[3]{24\pi^2}}{a} \rightarrow \Theta_D = \frac{\hbar v_S q_D}{k_B} = 297 \text{ K}$$

A 10 K vale $T \ll \Theta_D$:

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

quello per unità di massa: $c_V = \frac{C_V}{M} = \frac{C_V}{N\, m_{cella}}$

↳ massa della cella

$$m_{Ag} = 107 \text{ uma} = 177.6 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$$

$$m_{cella} = 4 \cdot m_{Ag} = 710.5 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$$

$$c_V = \frac{12}{5}\pi^4 \left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3 \frac{k_B}{m_{cella}}$$

$$c_V(10 K) = 0.17 \frac{J}{kg K}$$

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 $\theta_D = 90K$. Quanto vale la distanza d_{PV} tra primi vicini? Quanto vale la velocità del suono v_S?

Soluzione

① $C_V = 3nk_B \rightarrow n = \frac{C_V}{3k_B} = \frac{1.32 \cdot 10^6\ JM^{-3}K^{-1}}{3 \cdot 1.38 \cdot 10^{-23}\ JK^{-1}} = 3.2 \cdot 10^{28}\ m^{-3}$

nel BCC : $n = \frac{2}{a^3} \rightarrow a = \left(\frac{2}{n}\right)^{1/3} = 4 \cdot 10^{-10}\ m = 4\ Å$

$d_{PV} = \frac{\sqrt{3}}{2} a = 3.46\ Å$

② $k_B\theta_D = \hbar v_S q_D$ con $q_D = \sqrt[3]{6\pi^2 n} = 1.23 \cdot 10^{10}\ m^{-1}$

$v_S = \frac{k_B\theta_D}{\hbar q_D} = \frac{1.38 \cdot 10^{-23}\ JK^{-1} \cdot 90K}{1.054 \cdot 10^{-34}\ J \cdot S \cdot 1.23 \cdot 10^{10}\ m^{-1}} = 960\ m/s$

ESERCIZIO 10

Un solido cristallizza in una struttura BCC con lato del cubo $a = 4.0$ Å e base biatomica. Esso presenta i seguenti modi fononici, triplamente degeneri:

$$\begin{cases} \omega_{ac} = (88\ cm^{-1}) \sin(qa/2) \\ \omega_{ot} = 180\ cm^{-1} \end{cases}$$

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.

<u>Soluzione</u>

(A) BCC. $\Theta_D = \dfrac{\hbar\omega_D}{k_B} = \dfrac{\hbar v_S q_D}{k_B}$

$$v_S = \left.\frac{d\omega_{ac}}{dq}\right|_{q=0} = 88\ cm^{-1}\,\frac{a}{2} = 88\cdot(2\pi c)\,\frac{a}{2} =$$

$$= 8\pi c a = 3.3\cdot 10^5\ cm/s$$

$$q_D = \sqrt[3]{6\pi^2 n} = \frac{\sqrt[3]{6\pi^2 2}}{a} = 1.23\cdot 10^8\ cm^{-1} \qquad \left(\begin{matrix}1.54\cdot 10^8\ cm^{-1}\\ \text{se FCC}\end{matrix}\right)$$

$\rightarrow \Theta_D = 310\ K$

→

(B) A 10 K $T \ll \Theta_D$, uso Debye:

$$C_V(10) = \frac{12}{5}\pi^4\left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3 n\, k_B = \frac{12}{5}\pi^4\left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3 \frac{2}{a^3} k_B =$$

$$= 3.4 \cdot 10^4 \ \mathrm{erg/cm^3 K}$$

controllo la temperatura degli ottici:

$$T_{ott} = \frac{hc\,\omega_{ott}}{k_B} = 259\ \mathrm{K}$$ ← Non sono eccitati gli ottici a 10 K! quindi trascuro il loro contributo

a 700 K, $T \gg \Theta_D, \Theta_{ott}$ quindi uso Dulong e Petit per i 6N modi (3 acustici e 3 ottici):

$$C_V(700\ \mathrm{K}) = 6\, n\, k_B = \frac{6 \cdot 2}{a^3} k_B = 5.2 \cdot 10^7 \ \frac{\mathrm{erg}}{\mathrm{cm^3 K}}$$

NOTA!

le frequenze date in $\mathrm{cm^{-1}}$ sono numeri d'onda:

$$\tilde{\nu} = \frac{\nu}{c} \qquad \underset{\mathrm{s^{-1}}}{\omega} = 2\pi c \underset{\mathrm{cm^{-1}}}{\tilde{\nu}}$$

ESERCIZIO 11 Soluzione

① la costante elastica si ricava dal valore di ω in centro zona

$$\omega_0 = 2\pi c \tilde{\nu}_0 = 6.28 \cdot 3 \cdot 10^{10} \cdot 318 = 6 \cdot 10^{13} \text{ rad/s}$$

$$C = \frac{M_1 M_2 \omega_0^2}{2(M_1+M_2)} = 9.7 \cdot 10^{+3} \frac{\text{dyne}}{\text{cm}}$$

per cui:

$$\omega_1 = \sqrt{\frac{2C}{M_2}} = 0{,}48 \cdot 10^{14} \text{ rad/s} \qquad \text{OTTICA}$$

$$\omega_2 = \sqrt{\frac{2C}{M_1}} = 0{,}36 \cdot 10^{14} \text{ rad/2} \qquad \text{ACUSTICA}$$

② v_s si ottiene dalla legge di dispersione acustica in $q=0$

$$v_s = \left.\frac{d\omega_{AC}}{dq}\right|_{q=0} = \omega_2 \frac{a}{2} \cos\left(\frac{qa}{2}\right)\bigg|_{q=0} = \omega_2 \frac{a}{2}$$

trovo a: $\rho = \dfrac{(5+9)/2 \cdot 1.67 \cdot 10^{-24}}{a^3} \rightarrow a = 2.5 \cdot 10^{-8}$ cm

e $v_s = 4.5 \cdot 10^5$ cm/s

③ $n = \dfrac{1}{a^3} = 6.4 \cdot 10^{22}$ atomi/cm^3

$$\theta_D = \frac{\hbar\omega_D}{k_B} = \frac{\hbar v_s q_D}{k_B} = 452 \text{ K}$$

a $T = 3$K, $T \ll \theta_D$: uso il mod. di Debye per gli acustici

$$\frac{C_v}{V} = \frac{12}{5}\pi^4 n\, k_B \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3 = 6.0 \cdot 10^2 \text{ erg/K cm}^3$$

a $T = 600$ K, $T \gg \theta_D$ uso Dulong e Petit (3N acustici + 3N ottici)

$$\frac{C_v}{V} = 6\frac{N}{V}k_B = 6 n k_B = 5.3 \cdot 10^7 \frac{\text{erg}}{\text{K cm}^3}$$

ESERCIZIO 12

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

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

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

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

Soluzione

(1) Nell'SC il numero delle celle è uguale al numero degli atomi: $N = N_a$

Date le dispersioni possiamo trovare le velocità di gruppo:

$$\begin{cases} \left(\frac{d\omega}{dq}\right)_T = \frac{a}{2}\, \omega_{AT}^{0} \cos\left(\frac{qa}{2}\right) \\ \left(\frac{d\omega}{dq}\right)_L = \frac{a}{2}\, \omega_{AL}^{0} \cos\left(\frac{qa}{2}\right) \end{cases} \qquad (1)$$

Per $T \ll \Theta_D$, solo gli stati ~~p~~ di bassa energia, ~~ac~~ quindi a q piccolo, sono popolati, quindi ~~tr~~ troviamo una dispersione lineare $\omega_{T,L} = v_{T,L}\, q$ (mod. Debye) dove le velocità del suono sono date dal limite per $q \to 0$ delle (1):

$$\begin{cases} v_T = \lim_{q \to 0} \left(\frac{d\omega}{dq}\right)_T = \frac{a}{2}\, \omega_{AT}^{0} \\ v_L = \lim_{q \to 0} \left(\frac{d\omega}{dq}\right)_L = \frac{a}{2}\, \omega_{AL}^{0} \end{cases}$$

A queste temperature, ognuno dei tre modi contribuisce a C_V con:

$$C_V^{i} \simeq \frac{4\pi^4}{5}\, n k_B \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3 \qquad n = \frac{N}{V} \qquad i = 1,2,3 \text{ (scorre sulle 3 branche)}$$

→

Abbiamo 1 modo longitudinale e 2 trasversali, quindi:

$$C_V = 1 \cdot \left(\frac{4}{5} \pi^4 n k_B \left[\frac{T}{\theta_D^L} \right]^3 \right) + 2 \cdot \left(\frac{4}{5} \pi^4 n k_B \left[\frac{T}{\theta_D^T} \right]^3 \right) =$$

$$= \frac{4}{5} \pi^4 n k_B \left[\left(\frac{T}{\theta_D^L} \right)^3 + 2 \left(\frac{T}{\theta_D^T} \right)^3 \right] \qquad \text{con:}$$

$$\theta_D^L = \frac{\hbar v_L}{k_B} (6\pi^2 n)^{1/3} \qquad e \qquad \theta_D^T = \frac{\hbar v_T}{k_B} (6\pi^2 n)^{1/3}$$

Sostituendo:

$$C_V = \frac{4}{5} \pi^4 n k_B T^3 \left(\frac{k_B}{\hbar} \right)^3 \frac{1}{6\pi^2 n} \left(\frac{1}{v_L^3} + \frac{2}{v_T^3} \right) =$$

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

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

$$= (0{,}9951 \cdot 10^4 \cdot 0{,}0439)\, T^3 \; J/K^4 m^3 = 436{,}85 \cdot T^3 \; J/K^4 m^3$$

2. Nel caso di un FCC con stesso parametro reticolare, il volume della cella primitiva è 4 volte più piccola (nella cella unitaria di volume a^3 infatti entrano $8 \cdot \frac{1}{8} + 6 \cdot \frac{1}{2} = 4$ atomi), pertanto la capacità termica è 4 volte ~~più~~ maggiore.
Nel caso del BCC sarà il doppio (nella cella unitaria di volume a^3 ci sono $2 = 8 \cdot \frac{1}{8} + 1$ atomi).

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:

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

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:

$$2q_d = \frac{2\pi}{a} \quad \Longrightarrow \quad q_D = \frac{\pi}{a}$$

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:

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

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:

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

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.

Soluzione

ESERCIZIO 2

(1) $v = \lim_{q \to 0} \left(\frac{d\omega}{dq} \right)$

$$v_L = \lim_{q \to 0} \left(\omega_0 \frac{a}{2} \cos\left(\frac{qa}{2}\right) \right) = \omega_0 \frac{a}{2} = 1.52 \cdot 10^{12} \cdot \frac{2 \cdot 10^{-10}}{2} \frac{m}{s} =$$

$$= 152 \ m/s$$

$$v_T = \lim_{q \to 0} \left(\omega_0 \left[\frac{a}{2} \cos\left(\frac{qa}{2}\right) + a \cos(qa) \right] \right) = \omega_0 \left[\frac{a}{2} + a \right] = \frac{3}{2} a \omega_0 =$$

$$= \frac{3}{2} \, 2 \cdot 10^{-10} \cdot 1.52 \cdot 10^{12} \frac{m}{s} = 456 \ m/s$$

(2) $$q_D = \sqrt[3]{6\pi^2 n} = \sqrt[3]{6\pi^2 4/a^3} = \frac{\sqrt[3]{24\pi^2}}{2 \cdot 10^{-10} m} = 3.09 \cdot 10^{10} \ m^{-1}$$

$$\begin{cases} \omega_D^L = v_L q_D = 152 \frac{m}{s} \, 3.09 \cdot 10^{10} m^{-1} = 4.7 \cdot 10^{12} \ rad/s \\ \omega_D^T = v_T q_D = 456 \frac{m}{s} \, 3.09 \cdot 10^{10} m^{-1} = 1.4 \cdot 10^{13} \ rad/s \end{cases}$$

$$\begin{cases} \Theta_D^L = \frac{\hbar}{k_B} \omega_D^L = \frac{6.583 \cdot 10^{-16} eVs}{8.62 \cdot 10^{-5} eV/K} \, 4.7 \cdot 10^{12} \frac{rad}{s} = 35.9 \ K \\ \Theta_D^T = \frac{\hbar}{k_B} \omega_D^T = 106.9 \ K \quad (3\Theta_D^L) \end{cases}$$

(3) ~~[illegible]~~ $T = 5\,K \ll \Theta_D^L, \Theta_D^T$ → uso il mod. di Debye

$n = 4/a^3$

$$C_V = \frac{4}{5} \pi^4 n k_B T^3 \left[\frac{1}{(\Theta_D^L)^3} + \frac{2}{(\Theta_D^T)^3} \right]$$

$$C_V(5K) = \frac{4}{5} \pi^4 \frac{4}{(2 \cdot 10^{-10})^3 m^3} \cdot 1.38 \cdot 10^{-23} \frac{J}{K} \, 5^3 \left[\frac{1}{(35.9)^3} + \frac{2}{(106.9)^3} \right] =$$

$$= 1.56 \cdot 10^6 \frac{J}{K m^3} \qquad = \frac{176}{45} \pi^4 \frac{k_B}{a^3} \left(\frac{T}{\theta_L} \right)^3 = 1.78 \cdot 10^6 \frac{J}{K m^3}$$

(4) $C_V(800K)$: a 800 K siamo nel limite classico

$$C_V(800K) = 3 n k_B = \frac{12}{8 \cdot 10^{-30} m^3} \cdot 1.38 \cdot 10^{-23} \frac{J}{K} = 2.07 \frac{J}{K m^3}$$

(4) Aggiungo 3N modi ottici percui $C_V'(800K) = 6 n k_B = 4.14 \frac{J}{K m^3}$

Esercizio 17 - Es. 2 Appello I AA 2015/2016

Si abbia una catena lineare monoatomica di lunghezza totale L = 30 cm. La densità degli stati fononici della catena, nel modello di Debye, è indipendente dalla frequenza ω e vale $D(\omega) = 1.1935 \cdot 10^{-4}$ stati/Hz.

1. Trovare la velocità del suono della catena.
2. Calcolare il numero di atomi della catena sapendo che la frequenza di Debye vale $\omega_D = 8.38 \cdot 10^{12}$ Hz.
3. Calcolare la costante di forza C sapendo che la massa dell'atomo posto su ogni nodo della catena vale $M = 7 \cdot 10^{-27}$ Kg.
4. Calcolare l'energia media per unità di lunghezza della catena a T = 300 K giustificando le approssimazioni fatte.

Soluzione

1. La densità degli stati fononici in una catena lineare è indipendente dalla frequenza nel modello di Debye e si scrive come:

   $$D(\omega) = \frac{L}{\pi}\frac{1}{v_s}$$

   dove L è la lunghezza della catena e v_s la velocità del suono. Invertendola si trova la velocità del suono della catena:

   $$v_s = \frac{L}{\pi}\frac{1}{D} = \frac{0.3m}{\pi}\frac{1}{1.1935 \cdot 10^{-4}\ \mathrm{Hz}^{-1}} = 800\ \mathrm{m/s}$$

2. In questa catena il numero degli atomi è pari al numero degli stati fononici ammessi (cioè i modi), per cui:

   $$N = \int_0^{\omega_D} D(\omega)d\omega = D\,\omega_D = 1.1935 \cdot 10^{-4}\ \mathrm{Hz}^{-1} \cdot 8.38 \cdot 10^{12}\ \mathrm{Hz} = 10^9\ \text{atomi}$$

3. Nella catena la velocità del suono è : $v_s = a \cdot \sqrt{\frac{C}{M}}$.
   Ricaviamo la costante reticolare:

   $$a = \frac{L}{N} = \frac{0.3\ \mathrm{m}}{10^9} = 3\ \text{Å}$$

   E infine la costante di forza C:

   $$C = \left(\frac{v_s}{a}\right)^2 M = \left(\frac{800\ \mathrm{m/s}}{3\ \text{Å}}\right)^2 \cdot 7 \cdot 10^{-27}\ \mathrm{Kg} = 5 \cdot 10^{-2}\ \mathrm{N/m}$$

4. Valutiamo la temperatura di Debye della catena per sapere in che limite siamo:

   $$\Theta_D = \frac{\hbar\omega_D}{K_B} = \frac{1.054 \cdot 10^{-34} \cdot 8.38 \cdot 10^{12}}{1.38 \cdot 10^{-23}}\ \mathrm{K} = 64\ \mathrm{K}$$

T = 300 K è molto maggiore della temperatura di Debye per cui è giustificato utilizzare l'approssimazione classica:

$$u(T) = \frac{U(T)}{L} = \frac{NK_BT}{L} = \frac{K_B}{a}T$$

$$u(300K) = \frac{1.38 \cdot 10^{-23}\ \text{J/K}}{3 \cdot 10^{-10}\ \text{m}}\, 300\ \text{K} = 1.38 \cdot 10^{-11}\ \text{J/m}$$

Esercizio 18 - Es. 2 Appello II AA 2015/2016

Un cristallo ha densità $\rho = 8$ g/cm^3 ed un reticolo cubico semplice di lato a. Al reticolo è associata una base biatomica costituita da un atomo di massa $M_A = 5$ uma e da un atomo di massa $M_B = 8$ uma. Quest'ultimi si alternano a distanza $a/2$ l'uno con l'altro lungo i lati del cubo. La velocità del suono nel cristallo vale $v_s = 5.1 \cdot 10^5$ cm/s.

1. Trovare la frequenza dei modi ottici a centro zona.
2. Calcolare la capacità termica del solido per unità di massa a 100 K. Specificare quali modi contribuiscono a questa temperatura.
3. Calcolare la capacità termica del solido per unità di massa nel limite di alte temperature, specificando quali modi contribuiscono a questa temperatura.

Si ricorda che la relazione di dispersione per tale cristallo è:

$$\omega^2(q) = C\left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B}\right) \pm C\sqrt{\left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B}\right)^2 - \frac{4\,\sin^2(qa/2)}{M_A M_B}}$$

dove C è la costante di forza.

Soluzione

① $\omega_0(0) = \sqrt{2C\left(\frac{1}{M_A}+\frac{1}{M_B}\right)}$

la costante di forza si ricava dalla velocità del suono:

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

inoltre $a = \left(\frac{M_A+M_B}{\rho}\right)^{1/3} = \left(\frac{13 \cdot 1.66 \cdot 10^{-24}\,g}{8 \; g/cm^3}\right)^{1/3} = 1.39\ \text{Å}$

$$\Rightarrow C = 2(M_A+M_B)\left(\frac{v_S}{a}\right)^2 = 2 \cdot 13 \cdot 1.66 \cdot 10^{-24} g \cdot \left(\frac{5.1 \cdot 10^5\ cm/s}{1.39 \cdot 10^{-8}\ cm}\right)^2 =$$

$$= 5.8 \cdot 10^4\ \frac{dyne}{cm}$$

$$\Rightarrow \omega_0(0) = \sqrt{\frac{2 \cdot 5.8 \cdot 10^4}{1.66 \cdot 10^{-24}}\left(\frac{1}{5}+\frac{1}{8}\right)}\ Hz = 1.51 \cdot 10^{14}\ \frac{rad}{s}$$

② se considero 3N modi acustici e trascuro gli ottici

$$\theta_D = \frac{\hbar\omega_D}{k_B} = \frac{\hbar}{k_B} v_S \left(\frac{6\pi^2 N}{V}\right)^{1/3} = \frac{\hbar}{k_B}\frac{v_S}{a}\sqrt[3]{6\pi^2} = 1092\,K$$

$$C_V = \frac{12}{5}\pi^4 \frac{N}{M_{solido}} k_B \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3 = \frac{12\pi^4}{5}\frac{1}{\rho a^3} k_B \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3$$

$$C_V(100\,K) = 1.15 \cdot 10^2\ \frac{J}{kg \cdot K}$$

③ Ad alta T contribuiscono anche gli ottici (6N oscillatori) e si usa Dulong-Petit:

$$C_V = \frac{6N k_B}{M_{solido}} = \frac{6\,k_B}{\rho a^3} = 3.86 \cdot 10^3\ \frac{J}{kg\,K}$$