

Esonero I Materia Condensata. AA 2018/2019
(29/11/2018)

1 Esercizio 1

Si abbia un cristallo con struttura tetragonale e base monoatomica. Siano a e b i parametri reticolari, con $a < b$. Il terzo picco di diffrazione per raggi X di lunghezza d'onda $\lambda = 0.15$ nm si osserva ad un angolo di $\theta = 70^\circ$ e il fattore di impacchettamento vale 0.26.

- In che rapporto sono tra di loro i due parametri reticolari a e b ? (3)
- Calcolare i moduli dei tre vettori $\vec{G}_1, \vec{G}_2, \vec{G}_3$ di reticolo reciproco più corti. (5)
- Studiare il fattore di struttura e le riflessioni permesse con relative intensità. (2)
- Determinare gli angoli a cui si osservano il primo ad il secondo picco di diffrazione. (3)
- Trovare il valore dei parametri a e b . (2)

2 Esercizio 2

Un cristallo bidimensionale quadrato con base monoatomica vibra in due dimensioni. L'atomo A ha massa $M = 8.0$ u.m.a. e la densità vale $\rho = 2.0$ u.m.a./Å. Siano le relazioni di dispersione delle branche fononiche date da

$$\begin{aligned}\omega_{AL} &= \omega_{AL}^0 \sin\left(\frac{qa}{2}\right) \\ \omega_{AT} &= \omega_{AT}^0 \sin\left(\frac{qa}{2}\right)\end{aligned}$$

con $\omega_{AL}^0 = 2.5 \cdot 10^{12}$ rad/s e $\omega_{AT}^0 = 4.0 \cdot 10^{12}$ rad/s

- Quante branche sono presenti? Di che tipo? Disegnare in forma schematica le curve di dispersione fononica nella Prima Zona di Brillouin. (1)
- Determinare il valore del parametro reticolare a . (2)

- Determinare i valori delle velocità del suono. (4)
- Quanto vale la capacità termica per unità di volume a $T = 300$ K? (Si ricorda che $D_{2D}(\omega) = \frac{A\omega}{2\pi v^2}$). (5)
- Nel caso la base fosse biatomica e la relazione di dispersione per la banda ottica valesse $1.20 \cdot 10^{13}$ rad/s a centro zona, quanto varrebbe la capacità termica per unità di volume a $T = 400$ K? (3)

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

3 Soluzioni

3.1 Esercizio 1

1. Il rapporto tra i due parametri del reticolo si può ricavare dal fattore di impacchettamento. 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. In questo caso il raggio di ogni atomo R_{max} sarà la metà del lato più piccolo della cella del reticolo: $R_{max} = \frac{a}{2}$. In ogni vertice della cella c'è un'atomo condiviso con otto altre celle adiacenti, di conseguenza:

$$p.f. = \frac{8 \frac{1}{8} \frac{4}{3} \pi R_{max}^3}{a^2 b} = \frac{\frac{\pi}{3} a^3}{a^2 b} = \frac{\pi a}{6 b} = 0.26.$$

Risulta quindi

$$b = \frac{\pi}{6 \cdot 0.26} a = 2 a$$

2. I vettori primitivi del reticolo diretto sono

$$\begin{aligned} \vec{t}_1 &= a \hat{x} \\ \vec{t}_2 &= a \hat{y} \\ \vec{t}_3 &= b \hat{z} \end{aligned}$$

I vettori del reticolo reciproco sono

$$\begin{aligned} \vec{g}_1 &= \frac{2\pi}{a} \hat{x} \\ \vec{g}_2 &= \frac{2\pi}{a} \hat{y} \\ \vec{g}_3 &= \frac{2\pi}{b} \hat{z} \end{aligned}$$

I primi tre vettori più corti del reticolo reciproco sono

$$\begin{aligned}\vec{G}_1 &= \vec{g}_3 \\ \vec{G}_2 &= \vec{g}_1 \\ \vec{G}_3 &= \vec{g}_1 + \vec{g}_3.\end{aligned}$$

Infatti i loro moduli valgono

$$\begin{aligned}|\vec{G}_1| &= |\vec{g}_3| = \frac{2\pi}{b} = \frac{\pi}{a} \\ |\vec{G}_2| &= |\vec{g}_1| = \frac{2\pi}{a} = 2|\vec{G}_1| \\ |\vec{G}_3| &= |\vec{g}_1 + \vec{g}_3| = \frac{\sqrt{5}\pi}{a} = \sqrt{5}|\vec{G}_1|.\end{aligned}$$

3. Il fattore di struttura di un cristallo 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 vettore di base. In questo caso la base è 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.

4. Essendo tutte le riflessioni permesse, ad ogni vettore del reticolo reciproco è associato un picco di diffrazione. Il terzo picco corrisponderà al terzo vettore più corto

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

Dalla condizione di Laue

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

si ottiene

$$|\vec{G}_3| = \frac{4\pi}{\lambda} \sin\left(\frac{\theta_3}{2}\right) = 2.40 \text{ \AA}^{-1}.$$

e riscrivendo i moduli di \vec{G}_1 e \vec{G}_2 in funzione di quello per \vec{G}_3

$$\begin{aligned}\theta_1 &= 2 \arcsin\left(\frac{\lambda |\vec{G}_1|}{4\pi}\right) = 2 \arcsin\left(\frac{\lambda |\vec{G}_3|}{4\pi \sqrt{5}}\right) = 14.72^\circ \\ \theta_2 &= 2 \arcsin\left(\frac{\lambda |\vec{G}_2|}{4\pi}\right) = 2 \arcsin\left(\frac{\lambda 2 |\vec{G}_3|}{4\pi \sqrt{5}}\right) = 29.69^\circ\end{aligned}$$

5. Da

$$|\vec{G}_3| = \frac{\pi \sqrt{5}}{a} = \frac{4\pi}{\lambda} \sin\left(\frac{\theta_3}{2}\right)$$

si ricava

$$a = \frac{\lambda \sqrt{5}}{4 \sin\left(\frac{\theta_3}{2}\right)} = 1.49 \text{ \AA}^{-1}$$

e

$$b = 2a = 2.92 \text{ \AA}^{-1}.$$

3.2 Esercizio 2

1. Il reticolo è bidimensionale e si muove in due dimensioni. Essendoci solo un atomo di base, si osservano solo le bande fononiche acustiche: una longitudinale, l'altra trasversale. A bordo zona la branca trasversale si trova piú in alto di quella longitudinale ($\omega_{AT}^0 > \omega_{AL}^0$)
2. Il valore del parametro reticolare si trova sfruttando la densità di massa. In un reticolo quadrato come quello in esame sono presenti 4 atomi, uno in ogni vertice e ognuno di essi è condiviso con altre quattro celle adiacenti. Di conseguenza il numero totale di atomi per cella risulta essere $4 \cdot 1/4 = 1$. Si ha

$$\rho = \frac{M}{a^2}$$

da cui

$$a = \sqrt{\frac{M}{\rho}} = \sqrt{\frac{8.0 \text{ u.m.a.}}{2.0 \text{ u.m.a. \AA}^{-2}}} = 2.0 \text{ \AA}.$$

3. Date le relazioni di dispersione delle branche acustiche, si ha

$$v_s^L = \left. \frac{d\omega_{AL}}{dq} \right|_{q=0} = \omega_{AL}^0 \frac{a}{2} = 2.5 \cdot 10^4 \text{ cm/s},$$

$$v_s^T = \left. \frac{d\omega_{AT}}{dq} \right|_{q=0} = \omega_{AT}^0 \frac{a}{2} = 4.0 \cdot 10^4 \text{ cm/s}$$

4. Per capire che approssimazione si deve usare per calcolare la capacità termica, è necessario calcolare le temperature di Debye $\theta_D^{L,T}$. Dalla formula

$$\hbar \omega_D^{L,T} = K_B \theta_D^{L,T}$$

nell'approssimazione di Debye $\omega_D \simeq v_s q_D$, con q_D vettore d'onda di Debye. In due dimensioni

$$N = \int_0^{\omega_D} D_{2D}(\omega) d\omega = \frac{A}{2\pi v_s^2} \int_0^{\omega_D} \omega d\omega = \frac{A}{2\pi v_s^2} \frac{\omega_D^2}{2}$$

con A area della cella del reticolo cristallino. Dato che in ogni cella c'è un solo atomo

$$\frac{N}{A} = n = \frac{1}{a^2} = \frac{\omega_D^2}{4\pi v_s^2}$$

ma in approssimazione di Debye si ha

$$v_s^2 q_D^2 = n 4\pi v_s^2,$$

da cui si ricave, infine, il vettore d'onda di Debye

$$q_D = \sqrt{4\pi n} = \frac{\sqrt{4\pi}}{a}.$$

Le due temperature di Debye risultano essere

$$\begin{aligned}\theta_D^L &= \frac{\hbar \omega_D^L}{K_B} = \frac{\hbar v_s^L q_D}{K_B} = \frac{\hbar v_s^L \sqrt{4\pi}}{K_B a} = 33.7 \text{ K} \\ \theta_D^T &= \frac{\hbar \omega_D^T}{K_B} = \frac{\hbar v_s^T q_D}{K_B} = \frac{\hbar v_s^T \sqrt{4\pi}}{K_B a} = 53.9 \text{ K}.\end{aligned}$$

Risulta quindi che $T = 300 \text{ K} \gg \theta_D^{L,T}$ e si può usare l'approssimazione di Dulong-Petit per il limite classico. La capacità termica per unità di volume, sarà dunque data da

$$c_v = \frac{C}{A} = 2n K_B = \frac{2}{a^2} K_B = 0.7 \text{ erg / K cm}^2.$$

5. Supponendo la relazione di dispersione ottica costante e uguale al valore del fonone ottico a centro zona, $\omega_{OT} = 1.20 \cdot 10^{13} \text{ rad/s}$, si stima la temperatura di Einstein θ_E

$$\theta_E = \frac{\hbar \omega_{OT}}{K_B} = 91.3 \text{ K}.$$

Quindi $T = 400 \text{ K} \gg \theta_D^{L,T}, \theta_E$ e si è nel caso di alte temperature dove tutti i modi sono attivati

$$c_v = 2n K_B + 2n K_B = 1.4 \text{ erg / K cm}^2.$$