Esonero I Materia Condensata. AA 2017/2018 (24/11/2017)

1 Esercizio 1

Si abbia un cristallo con struttura ortorombica e base monoatomica. Siano a, $b = 1.5\,a$ e $c = 2\,a$ i parametri reticolari. Il primo picco di diffrazione per raggi X di lunghezza d'onda $\lambda = 0.20$ nm si osserva ad un angolo di $\theta = 35°$.

- Determinare i vettori primitivi di traslazione del reticolo reciproco. (3)
- Studiare il fattore di struttura e le riflessioni permesse con relative intensità. (3)
- Trovare i valori dei parametri reticolari. (3)
- Trovare la distanza tra due piani della famiglia $\{111\}$. (3)
- Calcolare il fattore di impacchettamento. (3)

2 Esercizio 2

Una catena lineare monoatomica disposta lungo l'asse $\hat{x}$ è libera di muoversi nel piano $\hat{x}\hat{y}$. Sia $\rho = 7.50$ u.m.a. $\mathring{A}^{-1}$ la densità lineare e $a = 2.00\,\mathring{A}^{-1}$ il parametro reticolare.

- Quante branche e di che tipo sono presenti? Disegnare in forma schematica le curve di dispersione fononica nella Prima Zona di Brillouin. (2)
- Se a bordo zona i valori delle branche acustiche sono $\omega_{AL} = 1.25 \cdot 10^{13}$ rad/s e $\omega_{AT} = 1.45 \cdot 10^{14}$ rad/s, quanto valgono le costanti di forza associate al moto lungo $\hat{x}$, α, e a quello lungo $\hat{y}$, β? (4)
- Quale'è la velocità del suono? (3)
- Qual'è la capacità termica per unità di volume a $T_1 = 5.00$ K, $T_2 = 3.50 \cdot 10^2$ K, $T_3 = 3.00 \cdot 10^3$ K? (6)

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

3 Soluzioni

3.1 Esercizio 1

1. I vettori primitivi del reticolo diretto sono

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

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

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

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

$$|\vec{G}_1| = |\vec{g}_3| = \frac{2\,\pi}{c} = \frac{4\,\pi}{\lambda}\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \qquad \longrightarrow \qquad c = \frac{\lambda}{2\,\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)} = 3.33\,\text{Å}.$$

A seguire

$$a = \frac{c}{2} = 1.67\,\text{Å}, \quad b = 1.5\,a = 2.51\,\text{Å}.$$

4. I piani della famiglia $\{111\}$ sono perpendicolari al vettore del reticolo reciproco

$$\vec{G}_{111} = \vec{g}_1 + \vec{g}_2 + \vec{g}_3 = 2\,\pi\left(\frac{1}{a}, \frac{1}{b}, \frac{1}{c}\right).$$

La distanza tra due piani sarà pertanto

$$d_{111} = \frac{2\,\pi}{|\vec{G}_{111}|} = \frac{2\,\pi}{\frac{2\,\pi}{a\,b\,c}\sqrt{a^2b^2 + a^2c^2 + b^2c^2}} = \frac{a\,b\,c}{\sqrt{a^2b^2 + a^2c^2 + b^2c^2}} = 1.28\,\text{Å}.$$

5. 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: $R_{max} = \frac{a}{2}$.

$$p.f. = \frac{8\,\frac{1}{8}\,\frac{4}{3}\,\pi R_{max}^3}{a\,b\,c} = \frac{\pi\,a^3}{6\,a^3\,(1 \cdot 1.5 \cdot 2)} = 0.17.$$

(Un ottavo per ogni atomo. Un atomo in ognuno degli otto spigoli.)

3.2 Esercizio 2

1. Dato che la catena è lineare monoatomica e libera di muoversi in due dimensioni, ci saranno solo due branche acustiche: una longitudinale, l'altra trasversale.

2. Data la relazione di dispersione

$$\omega(q) = A\,\sin\left(\frac{q\,a}{2}\right) \tag{1}$$

a bordo zona si ha

$$\omega(q)\Big|_{q=\frac{\pi}{a}} = A\,\sin\left(\frac{\pi}{2}\right) = A \tag{2}$$

In questo caso si ha

$$\omega_{AL}(q)\Big|_{q=\frac{\pi}{a}} = \sqrt{\frac{4\,\alpha}{M}},$$
$$\omega_{AT}(q)\Big|_{q=\frac{\pi}{a}} = \sqrt{\frac{4\,\beta}{M}}$$

e, di conseguenza,

$$\alpha = \frac{M\,\omega_{AL}^2}{4} = 9.79 \cdot 10^2 \text{ dyne/cm},$$
$$\beta = \frac{M\,\omega_{AT}^2}{4} = 1.32 \cdot 10^5 \text{ dyne/cm}$$

essendo la massa M stata calcolata tramite la densità lineare ρ

$$\rho = \frac{M}{a} \qquad \longrightarrow \qquad M = \rho\, a = 7.50\,\text{u.m.a.}\,\mathring{\text{A}}^{-1} \cdot 2.00\,\mathring{\text{A}} = 15.00\,\text{u.m.a.}$$

3. Per trovare la velocità del suono si studia la relazione di dispersione a centro zona (piccoli valori di q)

$$\omega(q) = A\,\sin\left(\frac{q\,a}{2}\right) \underset{\mathrm{q}\sim 0}{\simeq} A\,\frac{q\,a}{2} = v_s\,q. \tag{3}$$

Di conseguenza

$$v_s^L = \sqrt{\frac{\alpha}{M}}\,a = 1.25 \cdot 10^5\,\text{cm/s},$$
$$v_s^T = \sqrt{\frac{\beta}{M}}\,a = 1.45 \cdot 10^6\,\text{cm/s}.$$

4. Calcolando la temperatura di Debye si capisce in che regime di temperature ci si trova (alto o basso rispetto a θ_D).
In una dimensione vale la relazione

$$N = \frac{L}{\pi} q = \frac{N\,a}{\pi} q \qquad \longrightarrow \qquad q_D = \frac{\pi}{a}$$

dove L è la lunghezza della catena.
Sfruttando poi le relazioni

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

e

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

si ha

$$\theta_D^{L,T} = \frac{\hbar\,\omega_D^{L,T}}{K_B} = \frac{\hbar\,v_s^{L,T}\,q_D}{K_B} =$$
$$= \frac{\pi \cdot 1.05 \cdot 10^{-27}\,\text{erg s}}{2.00 \cdot 10^{-8}\,\text{cm}\,1.38 \cdot 10^{-16}\,\text{erg}\,\text{K}^{-1}}\, v_s^{L,T} = \begin{cases} 1.49 \cdot 10^2\,\text{K} & \text{longitudinale} \\ 1.73 \cdot 10^3\,\text{K} & \text{trasversale} \end{cases}$$

Dato che $T_1 \ll \theta_D^{L,T}$, si usa l'approssimazione di Debye. Per ogni modo si ha un contributo alla capacità termica per unità di volume pari a

$$\frac{C_V(T)}{V} = \frac{\pi^2}{6}\,\frac{1}{a} K_B T. \tag{4}$$

Quindi, in questo caso,

$$\frac{C_V^{TOT}(T)}{V} = \frac{C_V^{AL}(T) + C_V^{AT}(T)}{V})\Big|_{T_1} = \frac{\pi^2}{6}\frac{1}{a}K_B T\left[\frac{1}{\theta_D^L} + \frac{1}{\theta_D^T}\right] =$$
$$= \frac{\pi^2 \cdot 1.38 \cdot 10^{-16}\mathrm{erg\,K^{-1}}\,5.00\mathrm{K}}{6 \cdot 2.00 \cdot 10^{-8}\mathrm{cm}}$$

Alla temperatura intermedia T_2, il contributo fononico sarà differente per le due branche acustiche. Per quella longitudinale si usa la legge di Dulong-Petit, per quella trasversale la formula di Debye. Si avrà dunque

$$\begin{aligned}
\frac{C_V^{TOT}(T)}{V} &= \frac{C_V^{AL}(T) + C_V^{AT}(T)}{V})\Big|_{T_2} = \\
&= \frac{1}{a}K_B + \frac{4}{5}\pi^4\,\frac{K_B}{a}\left(\frac{T_2}{\theta_D^T}\right)^3 = \\
&= (6.90 \cdot 10^{-9} + 4.45 \cdot 10^{-9})\,\mathrm{erg\,K^{-1}\,cm^{-1}} = \\
&= 1.14 \cdot 10^{-8}\,\mathrm{erg\,K^{-1}\,cm^{-1}}.
\end{aligned}$$

A T_3 si è in regime di alte temperature. Per entrambi i contributi fononici si usa la legge di Dulong-Petit.

$$\begin{aligned}
\frac{C_V^{TOT}(T)}{V} &= \frac{C_V^{AL}(T) + C_V^{AT}(T)}{V})\Big|_{T_3} = \\
&= \frac{2}{a}K_B = 1.38 \cdot 10^{-8}\,\mathrm{erg\,K^{-1}\,cm^{-1}}.
\end{aligned}$$