Fononi e calori reticolari - Testi degli esercizi

Fisica della Materia Condensata

Dipartimento di Matematica e Fisica

Università degli Studi Roma Tre

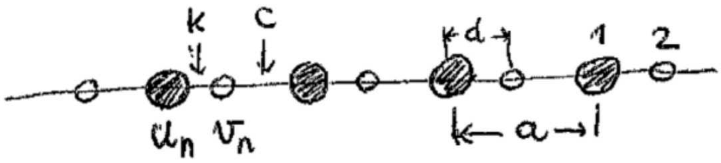
A.A. 2019/2020

Fononi e calori reticolari

Fononi e calori reticolari

Esercizio 1

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 dipendano 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 ($q = \frac{\pi}{a}$).



Esercizio 2

In una catena lineare di passo $a = 2.5$ Å, la velocità del suono per un'onda longitudinale è 10^5 cm/s. Calcolare:

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

Esercizio 3

Gli atomi di una catena lineare monoatomica (M=16 uma) disposta lungo l'asse $\hat{x}$, possono muoversi nel piano xy sotto l'effetto di un potenziale elastico del tipo:

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

dove $\alpha = 3\beta = 1.66 \cdot 10^4$ dyne/cm ed n è l'indice che scorre sugli atomi della catena.

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 centro e bordo zona.

Esercizio 4

Un cristallo con reticolo cubico semplice ha parametro reticolare $a = 1.5$ Å ed una temperatura di Debye $\Theta_D = 150$ K.

1. Calcolare la capacità termica reticolare per unità di volume c_V a T = 30 K e a T = 700 K.

2. Ricalcolare il punto 1 nel caso il cristallo abbia due atomi per cella cubica.

Esercizio 5

Lo stagno cristallizza in una struttura FCC con parametro reticolare di cella, misurato a T = 0 K, $a_0 = 6.384$ Å. E' noto che la temperatura di Debye dello stagno è $\Theta_D = 260$ K e che il parametro reticolare si espande secondo la legge $a(T) = a_0(1 + \alpha T)$ che si assume valere fino a 1000 K.

1. Calcolare il coefficiente di dilatazione α sapendo che la velocità del suono nello stagno è $v_s = 3527$ m/s a T = 150 K.

2. Calcolare la capacità termica reticolare per unità di volume a T = 50 K e T = 500 K.

Esercizio 6

Una catena lineare biatomica è disposta lungo l'asse $\hat{x}$ ed ha passo reticolare $a = 3$ Å. Sapendo che nella cella primitiva gli atomi sono indivituati dai due vettori $\vec{d_1} = \vec{0}$ e $\vec{d_2} = \frac{a}{3}\hat{x}$, che gli atomi hanno massa uguale (M = 21 uma) e che le costanti di forza valgono $\beta = 5$ Nm^{-1} quando la separazione tra due atomi primi vicini vale $a/3$ e $\gamma = 1$ Nm^{-1} quando vale $2a/3$,

1. Trovare i moti ionici a $q > 0$.

2. Determinare la velocità del suono v_s, il vettore d'onda di Debye k_D e la temperatura di Debye Θ_D.

Esercizio 7

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

$$\hbar\omega_{ac} = 8 \cdot 10^{-3} \sin\left(\frac{ka}{2}\right) \text{ eV}$$
$$\hbar\omega_{ot} = 7.5 \cdot 10^{-2} \text{ eV}$$

1. Determinare la velocità del suono v_s, il vettore d'onda di Debye k_D e la temperatura di Debye Θ_D.

2. Determinare la capacità termica C_V(T) nel modello misto Debye-Einstein.

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).

Esercizio 9

Un cristallo ha struttura BCC. La capacità termica per unità di volume nel limite classico è $c_V = 1.32 \cdot 10^6$ $\mathrm{Jm^{-3}K^{-1}}$. La temperatura di Debye del cristallo vale $\Theta_D = 90$ K. Quanto vale la distanza d tra primi vicini? Quanto vale la velocità del suono v_s ?

Esercizio 10

Un solido che cristallizza in una struttura cubica a corpo centrato (BCC) con lato del cubo $a = 4.0$ Å e base biatomica, presenta i seguenti modi fononici, triplamente degeneri:

$$\omega_{ac} = 88 \text{ sin}\left(\frac{qa}{2}\right) \text{ cm}^{-1}$$
$$\omega_{ot} = 180 \text{ cm}^{-1}$$

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.

Esercizio 11

Si assuma che un cristallo di litio metallico venga cresciuto mescolando in uguali proporzioni i due isotopi Li^5 e Li^9. Si ottiene un reticolo cubico semplice, con lato del cubo a, nel quale i due isotopi sono regolarmente alternati nelle tre direzioni dello spazio. La densità del cristallo è $\rho = 0.747$ g/cm^3. La dispersione della branca acustica triplamente degenere è $\omega_{ac} = A \sin\left(\frac{qa}{2}\right)$ e il numero d'onda del fonone ottico a centro zona è $\nu = 318$ cm^{-1}.

1. Ricavare le pulsazioni ottica e acustica a bordo zona.
2. Ricavare la velocità del suono v_s
3. Ricavare la capacità termica a volume costante del solido per unità di volume a T = 3 K e a T = 600 K, assumendo che il vettore d'onda di Debye sia $q_D = 1.05\pi/a$.

La massa media di un nucleone è $m = 1.67 \cdot 10^{-24}$ g.

Esercizio 12

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

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

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

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

Esercizio 13 - Es. 2 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:

   $C_v^{\text{Debye}}(T) = \frac{4}{5}\pi^4 N\, K_B \left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3$

Esercizio 14 - Es. 2 Appello 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:

   $C_v^{\text{Debye}}(T) = \frac{4}{5}\pi^4 N\, K_B \left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3$

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.

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.

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.

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.