Fizica solidului
- examen parțial -

6 decembrie 2024

Durata examenului este de două ore. Numerotați paginile cu rezolvările. Este permisă utilizarea oricărei surse bibliografice.

1. **(4p)** Cobaltul (Co) cristalizează într-o structură hexagonal compactă. Vectorii care generează celula primitivă hexagonală sunt

$$\begin{aligned} \vec{a}_1 &= a\hat{x} \\ \vec{a}_2 &= \frac{a}{2}(-\hat{x}+\sqrt{3}\hat{y}) \\ \vec{a}_3 &= c\hat{z} \end{aligned} \tag{1}$$

în care a și c sunt constantele de rețea, iar pozițiile atomilor în celula primitivă sunt (coordonate fracționare, relative la vectorii din ec. (1))

$$\text{Co: } [[0\;0\;0]]\,, \quad \left[\left[\frac{2}{3}\;\frac{1}{3}\;\frac{1}{2}\right]\right]$$

   (a) Calculați vectorii rețelei reciproce, $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$, precizați tipul rețelei reciproce și determinați distanțele interplanare $d_{hkl} = \frac{2\pi}{Q_{hkl}}$, cu $\vec{Q}_{hkl} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3$.

   (b) Calculați factorul de structură F_{hkl}. Există extincții sistematice? Dacă da, care este originea lor?

   (c) Se efectuează un experiment de difracție de raze X ($\lambda = 1.5406\ \mathring{A}$) pe o pudră fină de Co. Primele trei maxime de difracție se înregistrează respectiv la $2\theta = 42.177^\circ,\ 45.054^\circ,\ 48.111^\circ$ și corespund reflexiilor pe planele (100), (002) și respectiv (101). Determinați constantele de rețea a și c.

   (d) Maximul de difracție (111) este vizibil în spectrul înregistrat? Dar maximul (102)? Explicați.

2. **(5p)** Se consideră o rețea 2D pătrată cu un atom pe celula primitivă. Constanta rețelei este a. Dinamica atomilor din nodurile rețelei este descrisă de energia potențială corespunzătoare vibrațiilor de tip "întindere" (*stretching*) asociată interacției dintre vecinii de ordin I și II în rețea:

$$\begin{aligned} U_v &= \frac{1}{2}\sum_{\vec{R}}\left[\frac{C_1}{2}\Big(|\hat{a}_1\cdot(\vec{u}_{\vec{R}+\vec{a}_1}-\vec{u}_{\vec{R}})|^2 + |\hat{a}_1\cdot(\vec{u}_{\vec{R}-\vec{a}_1}-\vec{u}_{\vec{R}})|^2\right. \\ &+ |\hat{a}_2\cdot(\vec{u}_{\vec{R}+\vec{a}_2}-\vec{u}_{\vec{R}})|^2 + |\hat{a}_2\cdot(\vec{u}_{\vec{R}-\vec{a}_2}-\vec{u}_{\vec{R}})|^2\Big) \\ &+ \frac{C_2}{2}\left(\left|\frac{\hat{a}_1+\hat{a}_2}{\sqrt{2}}\cdot(\vec{u}_{\vec{R}+\vec{a}_1+\vec{a}_2}-\vec{u}_{\vec{R}})\right|^2 + \left|\frac{-\hat{a}_1-\hat{a}_2}{\sqrt{2}}\cdot(\vec{u}_{\vec{R}-\vec{a}_1-\vec{a}_2}-\vec{u}_{\vec{R}})\right|^2\right. \\ &+ \left.\left.\left|\frac{\hat{a}_1-\hat{a}_2}{\sqrt{2}}\cdot(\vec{u}_{\vec{R}+\vec{a}_1-\vec{a}_2}-\vec{u}_{\vec{R}})\right|^2 + \left|\frac{-\hat{a}_1+\hat{a}_2}{\sqrt{2}}\cdot(\vec{u}_{\vec{R}-\vec{a}_1+\vec{a}_2}-\vec{u}_{\vec{R}})\right|^2\right)\right] \end{aligned}$$

în care

$$\vec{a}_1 = a\hat{x}, \quad \hat{a}_1 = \tfrac{\vec{a}_1}{a_1} = \hat{x}$$
$$\vec{a}_2 = a\hat{y}, \quad \hat{a}_2 = \tfrac{\vec{a}_2}{a_2} = \hat{y}$$

sunt vectorii fundamentali ai rețelei, $\vec{R} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2$ $n_{1,2} \in \mathbb{Z}$ fiind vectorii Bravais. Se consideră numai interacții între vecinii din prima sferă de coordinație ($i = \overline{1,4}$, reprezentată de "arcul" albastru) și, respectiv, din a doua ($i = \overline{5,8}$, reprezentată de "arcul" roșu, a se vedea Fig. 1 stânga).

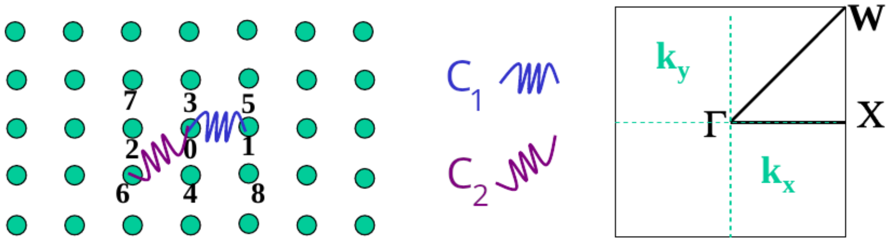

Figura 1: Rețea 2D pătrată cu un atom în celula primitivă, cu cuplaj de tip *stretching* între atomi (stânga). Punctele și direcțiile de simetrie înaltă din prima zonă Brillouin sunt indicate în figura din dreapta.

(a) Calculați constantele de forță și determinați matricea dinamică corespunzătoare acestei structuri.

(b) Să se determine legile de dispersie fononice pe direcția $\Gamma - X$ (a se vedea Fig. 1, dreapta), unde $\vec{k} = (k_x, 0)$. Care este forma legilor de dispersie în vecinătatea centrului primei zone Brillouin? Ce fel de moduri fononice sunt? Argumentați. Care este semnificația ramurilor $\omega_s(\vec{k})$, în termeni de polarizare (L sau T)?

(c) Să se determine legile de dispersie fononice pe direcția $\Gamma - W$, unde $\vec{k} = (k, k)$. Care este forma legilor de dispersie în vecinătatea centrului primei zone Brillouin? Care este corespondența ramurilor $\omega_s(\vec{k})$ cu starea de polarizare (L sau T)?

Se acordă **1p** din oficiu.
Succes!