UNIVERSITA' DEGLI STUDI DI CATANIA

Dipartimento di Scienze MM FF NN

Corso di Laurea di primo livello in Fisica

Frequenze proprie di una catena unidimensionale

Cristalli e quasicristalli

Oscillazioni e onde

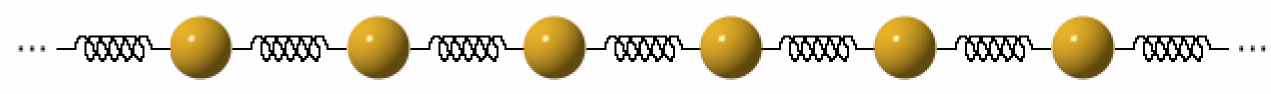
Anno Accademico 2005/2006

Corsaro Enrico Maria Nicola

Matricola N° 665/000327

1 – INTRODUZIONE

In questo testo, trattiamo un breve studio dei moti oscillatori longitudinali prodotti da una catena di masse unidimensionale, collegate fra loro da molle, come mostrato in figura.



Sfrutteremo i risultati di tale studio per comprendere il comportamento del reticolo atomico di sostanze cristalline e non.

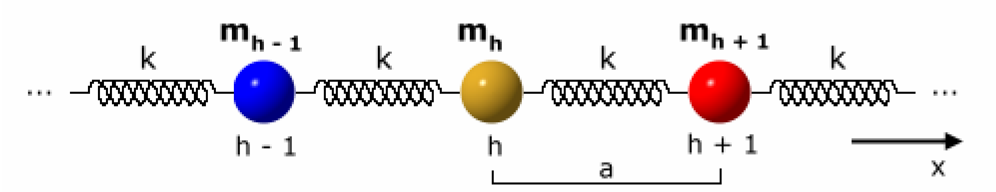
Sostanzialmente il reticolo di un cristallo è costituito da un insieme di atomi (o ioni), le cui posizioni di equilibrio sono distribuite in modo ***ordinato*** lungo le tre direzioni spaziali. Ogni atomo (o ione) di conseguenza oscilla intorno alla propria posizione di equilibrio con una ben determinata frequenza.

Questo moto oscillatorio può essere opportunamente descritto tramite la relazione che lega la frequenza angolare **ω** al numero d'onda **q**; la quale prende il nome di ***relazione di dispersione*** ed è una caratteristica propria del reticolo cristallino che consideriamo.

Vedremo infine un particolare caso di distribuzione degli atomi (o ioni) in un reticolo, quello che costituisce un cosiddetto ***quasicristallo***, ovvero una distribuzione aperiodica ma non caotica. E' interessante a tal proposito vedere come possano propagarsi in esso le onde (sonore ad esempio, cioè le vibrazioni).

2 – FREQUENZE DI OSCILLAZIONE

Consideriamo dapprima una catena unidimensionale costituita da un numero N di masse, collegate fra loro da N + 1 molle e vediamo di ricavare al passo h l'equazione del moto, sfruttando la seguente figura.



Poniamo inizialmente che tutte le masse siano differenti, e che invece la costante elastica sia unica per tutte le molle. Chiamiamo ***a*** il passo reticolare e consideriamo la h-esima massa.

Se definiamo $\mathbf{u_h}$ **(t)** la funzione del tempo che ci fornisce lo spostamento della h-esima massa dalla sua posizione di equilibrio, abbiamo che per la h-esima massa la posizione nel reticolo è:

$$x_h(t) = u_h(t) + ha$$

e analogamente per la massa successiva:

$$x_{h+1}(t) = u_{h+1}(t) + (h+1)a$$

Lo spostamento effettivo da considerare dunque per scrivere l'equazione del moto sfruttando la legge di Hooke che agisce in un sistema massa-molla

$$m_h \ddot{u}_h = -k\Delta\ell$$

è in questo primo caso

$$\Delta\ell_1 = x_{h+1} - x_h - a = u_{h+1} - u_h$$

Procedendo allo stesso modo relativamente alla massa precedente e sommando i contributi dovuti alle due forze agenti, troviamo così l'espressione delle N equazioni del moto:

$$m_h \ddot{u}_h = k(u_{h+1} - u_h) - k(u_h - u_{h-1})$$

$$m_h \ddot{u}_h = k(u_{h+1} - 2u_h + u_{h-1}) \qquad \textbf{(2.1)}$$

che costituisce per l'appunto un sistema di N equazioni differenziali ordinarie del II ordine.

A questo punto, dato che ci interessa studiare le frequenze di oscillazione, consideriamo una soluzione oscillante del tipo

$$u_h(t) = u_h^{(0)} e^{i\omega t}$$

(in modo equivalente si sarebbe potuto considerare una funzione del seno o del coseno) e di seguito derivandola due volte rispetto al tempo e sostituendola all'equazione del moto, otteniamo:

$$k u_{h+1}^{(0)} + (m_h \omega^2 - 2k) u_h^{(0)} + k u_{h-1}^{(0)} = 0 \qquad \textbf{(2.2)}$$

Abbiamo così trovato un sistema di equazioni lineari. Operando un'opportuna sostituzione che riscali le soluzioni iniziali alle masse, del tipo

$$u_h^{(0)} = \frac{y_h^{(0)}}{\sqrt{m_h}}$$

è possibile portare il sistema ad un problema agli autovalori

$$-\frac{k}{\sqrt{m_{h+1} m_h}} y_{h+1}^{(0)} + \frac{2k}{m_h} y_h^{(0)} - \frac{k}{\sqrt{m_{h-1} m_h}} y_{h-1}^{(0)} = \omega^2 y_h^{(0)}$$

che è del tipo

$$A\vec{y} = \omega^2 \vec{y}$$

e i cui autovalori sono i quadrati delle frequenze di oscillazione del reticolo (**y** è un vettore ad N componenti).

3 – IL RETICOLO CRISTALLINO

Per analizzare le caratteristiche di un cristallo, riprendiamo adesso l'equazione (2.2) assumendo che $\mathbf{m_h} = \mathbf{m}$, ovvero tutte le masse siano uguali.

$$k u_{h+1}^{(0)} + (m \omega^2 - 2k) u_h^{(0)} + k u_{h-1}^{(0)} = 0 \qquad \textbf{(3.1)}$$

Consideriamo una soluzione spaziale, che tenga conto cioè della posizione della massa presente nel reticolo, del tipo

$$u_h^{(0)} = A e^{iqha}$$

dove **a** è il passo reticolare, **q** è il numero d'onda (che ha dimensione dell'inverso di una lunghezza) e **h** è l'indice relativo alla massa che si sta considerando (h = 1, 2, …, N).

In pratica, fissato un indice h e scelto un ω cerchiamo le soluzioni del numero d'onda q compatibili con la frequenza scelta. Possiamo visualizzare questo se consideriamo di fissare la catena in un istante di tempo e vedere come varia lo spostamento al variare della posizione h.

Sostituendo la soluzione alla (3.1) otteniamo quanto segue

$$kAe^{iq(h+1)a} + (m\omega^2 - 2k)Ae^{iqha} + kAe^{iq(h-1)a} = 0$$

da cui ricaviamo con opportuni passaggi algebrici la ***relazione di dispersione***

$$\omega = 2\omega_0 \left| \sin \frac{qa}{2} \right| \tag{3.2}$$

dove

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

è la pulsazione massima del tipo massa-molla.

Considerando di seguito delle condizioni a contorno periodiche, ad esempio quella cosiddetta di Born-von Kàrmàn, dobbiamo imporre che il punto finale della catena coincida con quello iniziale (cioè sostanzialmente che la catena sia chiusa).

La soluzione generale all'equazione del moto (2.1) è

$$u_h(t) = Ae^{iqha + i\omega t}$$

e imponendo le condizioni a contorno di Born-von Kàrmàn, otteniamo

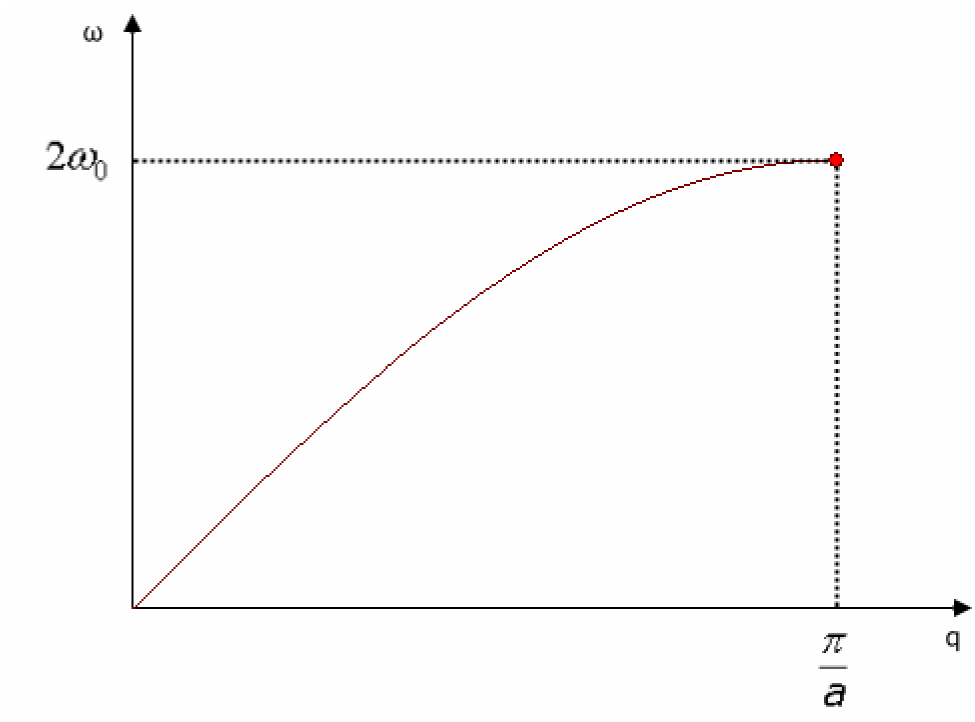
$u_0^{(0)} = A$ e $u_N^{(0)} = Ae^{iqNa}$

$u_0^{(0)} = u_N^{(0)} \Leftrightarrow A = Ae^{iqNa} \Rightarrow e^{iqNa} = 1$

e dalla formula meravigliosa ricaviamo che

$$e^{iqNa} = e^{i2k\pi} \Rightarrow q = \frac{2\pi}{a}\frac{k}{N}$$

dove k è un indice che rappresenta gli N diversi valori che può assumere q fissato un numero N di masse. Per N molto grande q si comporta come una variabile continua (è in realtà discreta).



Come mostra il grafico della relazione di dispersione notiamo che per piccoli valori del numero d'onda q la relazione è praticamente lineare (caratteristica di un sistema continuo) mentre per valori di q più grandi la linearità si rompe fino ad arrivare ad un valore massimo.

4 – QUASICRISTALLI

Passiamo adesso, per concludere, ad una rapida trattazione dei quasicristalli. Il concetto di quasicristallo nacque nel 1984 legato ad un problema matematico posto da Penrose, ovvero quello di tassellare totalmente un piano in modo non periodico. La particolarità di un quasicristallo è che in esso gli atomi (o ioni) si succedono secondo una sequenza ben precisa, la quale, però, ci impedisce di riscontrare un periodismo e, al contempo, una totale casualità nella distribuzione.

Ci avvaliamo adesso della cosiddetta **successione di Fibonacci**, nata dal problema di Fibonacci, posto nel 1202, di conoscere il numero di conigli generati in un anno da una coppia di conigli. La successione consta di due termini C ed A. C rappresenta la coppia di conigli piccoli (child) mentre A rappresenta la coppia di conigli adulti (adult). Tale successione si basa sul fatto che ad ogni iterazione

$$C \to A \text{ e } A \to AC$$

proseguendo così otteniamo ad esempio per i primi 5 steps

$$C \to A \to AC \to ACA \to ACAAC \to \ldots$$

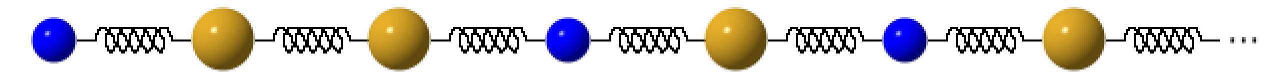
Notiamo che il numero dei termini ad uno step i-esimo, con i > 2, è uguale alla somma del numero dei termini dei due step precedenti.

$$f_i = f_{i-1} + f_{i-2}$$

Si ha inoltre che il rapporto dei valori assunti dalla successione a due step successivi è costante e tale valore è uguale alla cosiddetta ***sezione aurea*** (un numero che spesso ricorre in molte opere architettoniche e artistiche, come ad esempio nell'uomo vitruviano di Leonardo).

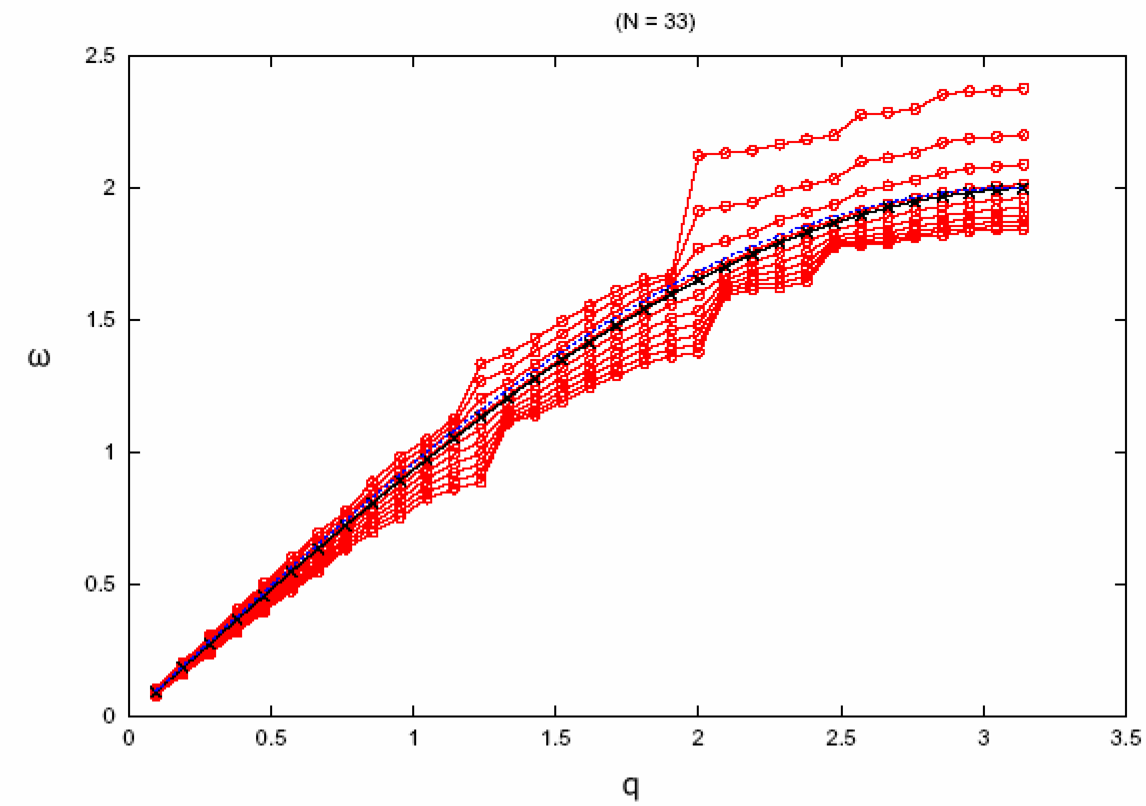
$$\lim_{i \to \infty} \frac{f_{i+1}}{f_i} = \varphi = \frac{1+\sqrt{5}}{2}$$

Ritornando dunque alla catena unidimensionale, distribuiamo due valori differenti delle masse in modo tale che esse seguano la successione di Fibonacci, così come in figura.

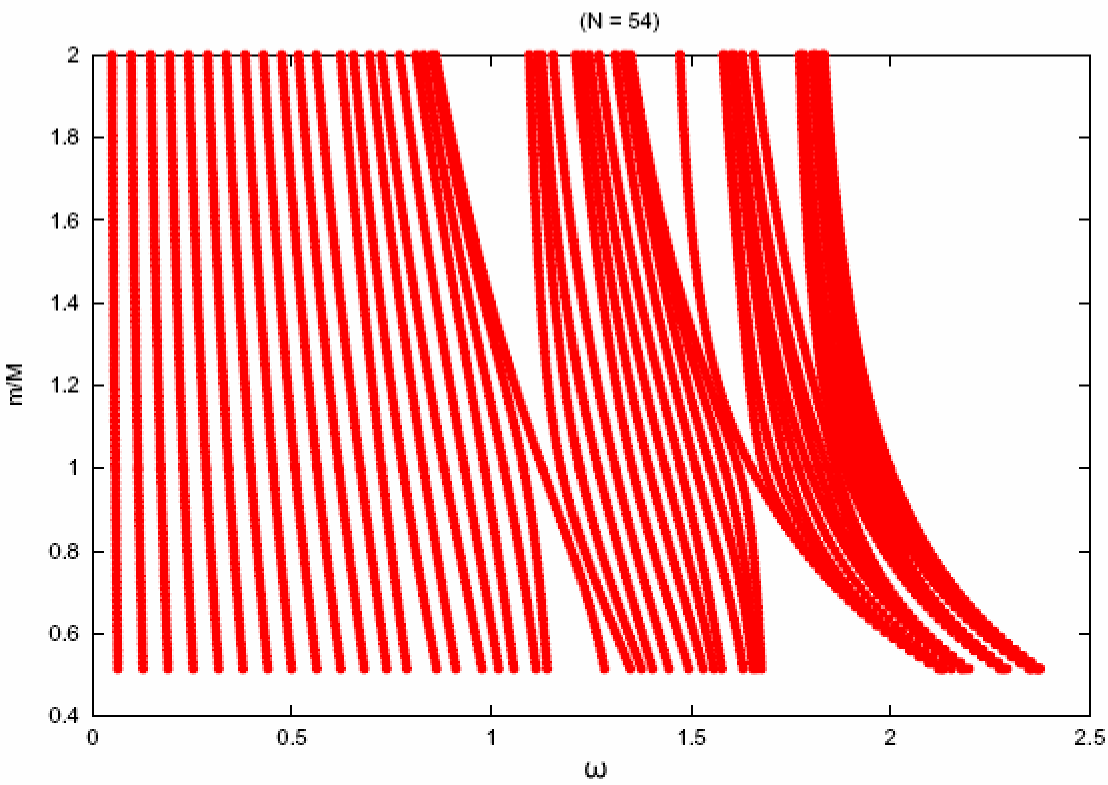


Quanto così ottenuto è l'analogo della struttura del reticolo di un quasi-cristallo. Di seguito, riportando in un grafico la relazione di dispersione (3.2) per un cristallo e confrontandola con quella ottenuta per un quasicristallo al variare del rapporto m/M delle due masse coinvolte nella successione, notiamo che compaiono dei cosiddetti "gep" ovvero dei salti che corrispondono a valori della frequenza di oscillazione non possibili. Inoltre facendo tendere ad 1 il valore del rapporto tra le due masse, la relazione di dispersione si approssima sempre più a quella di un cristallo e per m/M = 1 in particolare coincide proprio con la (3.2). Questo ci dice sostanzialmente che per un quasicristallo esistono dei valori delle frequenze a cui il sistema non può oscillare e per i quali pertanto esso rimarrà fermo.

Nel grafico seguente, esplicativo, possiamo visualizzare la frequenza di oscillazione in funzione del numero d'onda per diversi valori del rapporto m/M (curve in rosso) e notiamo come i "gep" che vi compaiono siano sempre più evidenti man mano che il rapporto m/M si discosta dall'unità.



In questo secondo grafico, infine, invece è riportata la frequenza di oscillazione al variare del rapporto m/M delle due masse. Si può chiaramente notare come vi siano delle fasce vuote, le quali corrispondono a valori non possibili della frequenza di oscillazione.



BIBLIOGRAFIA

Cifr. **Corso di Metodi numerici per la fisica**.

2) Sistemi di equazioni lineari e problema agli autovalori.

- Progetto: Modi normali di una catena unidimensionale: caso periodico e caso quasi-periodico.