Corso di Materia condensata

Prova scritta del 11-9-12

Proff. P. Calvani e M. Capizzi

Esercizio 1

Una ipotetica catena lineare atomica è formata da un atomo X_1 di massa M_1 e da un suo isotopo X_2 di massa M_2 separati di $a/2$ e disposti lungo un asse assunto come asse x.

1) Se il rapporto fra le energie dei due modi fononici a bordo zona è 1.414, a quali elementi appartengono gli atomi X_1 e X_2?
2) E' possibile per questa catena atomica osservare un assorbimento ottico, e, in caso di risposta positiva, a quale energia?
3) Qualora si sostituisca l'atomo X_2 con un atomo di F di peso atomico 19, a quale energia sarà eventualmente possibile osservare un assorbimento ottico se la costante di forza e' ora C_2=2000 dyne/cm?
4) Se la densità di massa della catena di cui al punto 3) è ρ= $1,66 \times 10^{-15}$ g/cm, quanto vale la velocità del suono in questa catena?
5) **(Solo per gli studenti del prof. Capizzi)** Come cambiano il parametro reticolare, la densità lineare di massa, la dimensione della zona di Brillouin, se gli atomi della catena sono ora tutti uguali a X_1? Si mantenga invariata la distanza fra gli atomi.

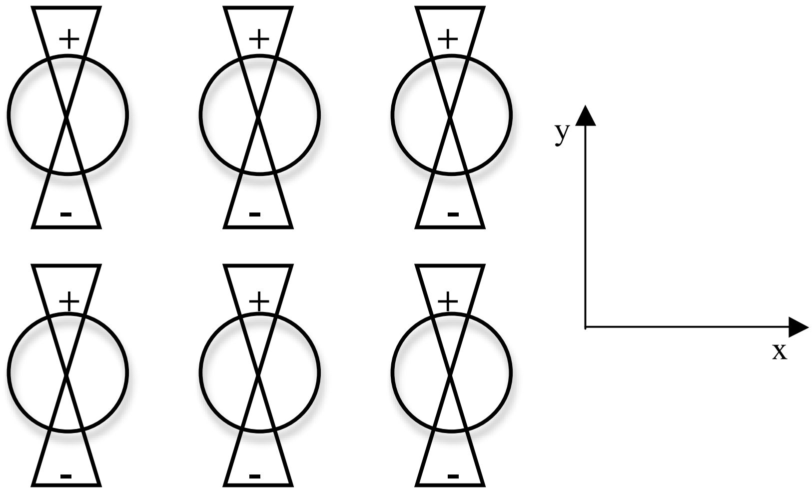
Si ricorda che i valori delle frequenze dei modi fononici per alcuni valori di K si possono ricavare da

$$\omega^4 M_1 M_2 - 2C\omega^2 (M_1 + M_2) + 2C^2 (1 - \cos Ka) = 0$$

u.m.a. = $1,66 \times 10^{-24}$ g; 1 eV = $2,42 \times 10^{14}$ Hz

Esercizio 2

Degli atomi siano disposti su di un reticolo quadrato di passo reticolare a = 2,0 Å



a) Scrivere la forma esplicita delle bande risultanti nell'approssimazione a “tight binding” a primi vicini da funzioni di tipo *s* e di tipo *p* disposte come in figura. Si trascurino le interazioni *s-p*.

$$\varepsilon_i(\bar{k}) = E_{0i} - \sum_{\bar{R}\neq 0} \gamma_i(\bar{R}) e^{i\bar{k}\cdot\bar{R}}$$

(dove $i = s,p$).

Si abbia $|\gamma_s| = 0{,}8$ eV; $|\gamma_{py}| = 2|\gamma_{px}| = 0{,}5$ eV. Inoltre $E_{0s} = 1{,}2$ eV; $E_{0p} = 4{,}8$ eV

b) Determinare il valore del quasimomento $\boldsymbol{k}$ lungo il perimetro della Z.B. per cui la differenza di energia fra le due bande ΔE raggiunge il suo MASSIMO $\Delta E_{\max}$ e determinare il valore della corrispondente differenza di energia.
c) trovare le componenti m_{xx} e m_{yy} delle masse efficaci dell’elettrone in entrambe le bande a $\boldsymbol{k}$=0.

$\hbar = 1{,}05\text{x}10^{-27}$ erg·s; 1 eV =$1{,}6\times10^{-12}$ erg

Soluzione 1° esercizio

1) La soluzione per le curve di dispersione dei modi fononici a bordo zona (***K***=π/*a* e $\cos Ka = -1$) è data da

$$\omega^2 = \frac{C(M_1+M_2)}{M_1M_2} \pm \left[\frac{C^2(M_1+M_2)^2}{(M_1M_2)^2} - \frac{4C^2}{M_1M_2}\right]^{1/2} =$$

$$= \frac{C(M_1+M_2)}{M_1M_2} \pm \frac{C(M_1-M_2)}{M_1M_2} = \begin{cases} \omega^2_{ott} = 2C/M_2 \\ \omega^2_{ac} = 2C/M_1 \end{cases} \quad \text{se } M_1 > M_2 \qquad (1)$$

Pertanto, il rapporto fra le energie dei modi fononici a bordo zona è dato da $M_1/M_2=2$. Essendo i due isotopi di massa doppia l'uno dell'altro, i due isotopi saranno l'idrogeno e il deuterio.

2) Non essendoci momento di dipolo fra H e D, non sarà possibile osservare alcun assorbimento ottico.

3) In questo caso è presente un momento di dipolo e pertanto si potrà osservare un assorbimento ottico all'energia del fonone ottico a ***K***=0, ove la soluzione della (1) è data da

$$\omega^2 = 2C_2\left(\frac{1}{M_1}+\frac{1}{M_2}\right) = 2\times 2000 \times \left(1+\frac{1}{19}\right)/1{,}66\times 10^{-24} = 25\times 10^{26}$$

$$\omega = 5{,}0\times 10^{13}\, rad/s = 8{,}0\times 10^{12}\, s^{-1} = 33\times 10^{-3}\, eV$$

4) La velocità del suono e' data dalla derivata per ***K***=0 della branca acustica

$$\omega^2_{ac} \cong \frac{C_2/2}{M_1+M_2}K^2a^2 \qquad \omega_{ac} = 0$$

ove *a* è il parametro reticolare, con

$$a = (M_1+M_2)/\rho = \frac{20\times 1{,}66\times 10^{-24}}{1{,}66\times 10^{-15}} = 2{,}0\times 10^{-8}\, cm$$

Pertanto

$$v_s = \left(\frac{C_2/2}{M_1+M_2}\right)^{1/2} a = \left(\frac{2000/2}{20\times 1{,}66\times 10^{-24}}\right)^{1/2} \times 2{,}0\times 10^{-8} = 1{,}1\times 10^5\, cm/s$$

5) Il parametro reticolare si dimezza.
La massa passa da 20 u.a. a 1 u.a., mentre il parametro reticolare si dimezza. Pertanto la densità lineare di massa diminuisce di un fattore 10.
La dimensione della ZB ovviamente raddoppia.

Soluzione 2° esercizio

a) Ogni atomo ha 4 primi vicini. Il coefficiente γ_s e' sempre positivo, mentre γ_{px} e' positivo e γ_{py} negativo. Quindi γ_s = 0,8 eV, γ_{px} = 0,25 eV e γ_{py}= -0,5 eV. Pertanto

$$\varepsilon_s(\bar{k}) = E_{0s} - 2\gamma_s \cos k_x a - 2\gamma_s \cos k_y a = 1{,}2 - 1{,}6\cos k_x a - 1{,}6\cos k_y a$$

$$\varepsilon_p(\bar{k}) = E_{0p} - 2\gamma_{px} \cos k_x a + 2|\gamma_{py}|\cos k_y a = 4{,}8 - 0{,}5\cos k_x a + 1{,}0\cos k_y a$$

b) Nella Z. B. la differenza di energia fra le due bande vale

$$\Delta E = \varepsilon_p(\bar{k}) - \varepsilon_s(\bar{k}) = 4{,}8 - 1{,}2 + (-0{,}5 + 1{,}6)\cos k_x a + (1{,}0 + 1{,}6)\cos k_y a =$$
$$= 3{,}6 + 1{,}1\cos k_x a + 2{,}6\cos k_y a$$

Anche la Z. B. è quadrata. Lungo i suoi bordi orizzontali $\left(k_x, \pm\frac{\pi}{a}\right)$ si ottiene

$\Delta E = 3{,}6 + 1{,}1\cos k_x a - 2{,}6 = 1{,}0 + 1{,}1\cos k_x a$

che è massima in $\left(0, \pm\frac{\pi}{a}\right)$ e vale 2,1 eV.

Lungo i bordi verticali $\left(\pm\frac{\pi}{a}, k_y\right)$ si ottiene

$\Delta E = 3{,}6 - 1{,}1 + 2{,}6\cos k_y a = 2{,}5 + 2{,}6\cos k_y a$

che è massima in $\left(\pm\frac{\pi}{a}, 0\right)$ e vale 5,1 eV.

Quindi $\Delta E_{\max}$= 5,1 eV nei due punti $\left(\pm\frac{\pi}{a}, 0\right)$.

c) Le componenti richieste della massa efficace si ricavano da

$$\left.\frac{\partial^2 E(k)}{\partial k_x^{\,2}}\right|_0 = 1{,}6a^2 \cos ka\big|_0 = 1{,}6a^2$$

$$\left.\frac{\partial^2 E(k)}{\partial k_y^{\,2}}\right|_0 = 1{,}6a^2 \cos ka\big|_0 = 1{,}6a^2$$

per la banda s e

$$\left.\frac{\partial^2 E(k)}{\partial k_x^{\,2}}\right|_0 = 0{,}5a^2 \cos ka\big|_0 = 0{,}5a^2$$

$$\left.\frac{\partial^2 E(k)}{\partial k_y^{\,2}}\right|_0 = -1{,}0a^2 \cos ka\big|_0 = -1{,}0a^2$$

per la banda p. Perciò le masse efficaci sono rispettivamente

$$m_{xx}^s(0) = m_{yy}^s(0) = \left(\frac{1}{\hbar^2}\frac{\partial^2 E(k)}{\partial k_x^{\,2}}\right)^{-1}_{k_x=0} = \frac{\hbar^2}{1{,}6a^2} = \frac{(1.05\times10^{-27})^2}{1{,}6\times1.6\times10^{-12}(2\times10^{-8})^2} = 1{,}1\times10^{-27}\ \text{g} = 1{,}2\ m_e$$

$$m_{xx}^{p}(0) = \left(\frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(k)}{\partial k_x{}^2} \right)_{k_x=0}^{-1} = \frac{\hbar^2}{0{,}5a^2} = \frac{(1.05\times10^{-27})^2}{0{,}5\times1.6\times10^{-12}(2\times10^{-8})^2} = 3{,}4\times10^{-27}\ \mathrm{g} = 3{,}8\ \mathrm{m_e}$$

$$m_{yy}^{p}(0) = -\frac{1}{2} m_{xx}^{p}(0) = -1{,}7\times10^{-27}\ \mathrm{g} = \text{-}1{,}9\ \mathrm{m_e}$$