FISICA DELLA MATERIA CONDENSATA

Proff. P. Calvani e M. Capizzi

Prova di esame - 26 Giugno 2014

Esercizio 1

Il rame è un metallo monovalente che cristallizza nella struttura cubica a facce centrate, con temperatura di Debye

$$T_D = \frac{\hbar}{k_B} v_s \left(\frac{6\pi^2 N}{V} \right)^{\frac{1}{3}} = 341 \text{ K},$$

(dove N/V e' il numero di atomi per unità di volume) con densità di elettroni $n_{el} = 8{,}47\times 10^{28}$ /m^3,

densità di massa d = 8920 kg/m^3, e velocità del suono v_s =2620 m/s.

Assumendo che ognuna delle 3 branche acustiche abbia la forma

$$\omega(k) = \sqrt{\frac{4C}{M_{Cu}}} \sin(\frac{1}{2} ka),$$

determinare

1) la massa del rame
2) la costante di forza C.
3) Infine, noto che l'energia interna per unità di massa del Cu si può scrivere

$$u(T) = \gamma T^2 + \alpha T^4$$

e che il calore specifico a volume costante (*ossia la capacità termica per unità di massa*), a 1 K e 2 K, vale rispettivamente

$$c_v(1\,\text{K}) = 1{,}2\times 10^{-2} \text{ J/kg K}$$

$$c_v(2\,\text{K}) = 2{,}8\times 10^{-2} \text{ J/kg K}$$

determinare le costanti α e γ e spiegare l'origine dei due contributi a *u(T).*

$\hbar = 1{,}05\times 10^{-34}$ J · s; $k_B = 1{,}38\times 10^{-23}$ J / K

Esercizio 2

In una catena lineare di N atomi monovalenti con passo reticolare $a = 1{,}2\times 10^{-8}$ cm si forma una banda dalla sovrapposizione di orbitali *s*. Utilizzando l'approssimazione a legame forte e sapendo che l'elemento di matrice diagonale (stesso sito) dell'Hamiltoniana elettronica vale $\varepsilon - \alpha$ = 0,8 eV, quello fra siti primi vicini vale t_1= 0,6 eV e quello fra secondi vicini vale t_2 = 0,1 eV,

a) si scriva l'espressione dell'energia della banda E(k);
b) si dica se la catena ha un comportamento metallico o isolante;
c) si determini il vettore d'onda di Fermi, k_F, e l'energia di Fermi, E_F, corrispondente;
d) si trovi la massa efficace degli elettroni a k = 0.

Soluzioni

Eesercizio 1
Essendo il rame monoatomico, le densità di atomi e di elettroni di conduzione saranno uguali. Poiché la struttura cristallina è quella cubica a facce centrate, ne segue

$$n_{at} = n_{el} = 8{,}47\times10^{28}\ /\ \mathrm{m}^3 = 4/a^3$$

dove 4 è il numero di atomi per cella fcc. Di qui,

$$a = \sqrt[3]{\frac{4}{n_{at}}} = \sqrt[3]{47{,}2\times10^{-30}} = 3{,}61\times10^{-10}\ \mathrm{m}$$

1) Ne segue

$$M_{Cu} = \frac{d}{n_{at}} = \frac{8920}{8{,}47\times10^{28}} = 1{,}06\times10^{-25}\ \mathrm{kg}$$

2)

$$2620 = v_s = \left.\frac{d\omega}{dk}\right|_{k\to0} = \left.\sqrt{\frac{C}{M_{Cu}}}\,a\cos\left(\frac{1}{2}ka\right)\right|_{k\to0} = \sqrt{\frac{C}{M_{Cu}}}\,a$$

$$C = \left(\frac{2620}{a}\right)^2 M_{Cu} = \left(\frac{2620}{3{,}61\times10^{-10}}\right)^2 1{,}06\times10^{-25} = 5.58\ \mathrm{N/m}$$

3)

Il contributo in T^2 a $u(T)$ corrisponde all'energia cinetica degli elettroni di conduzione, e quello in T^4 all'energia vibrazionale degli ioni. Derivando si ottiene

$$c_v(T) = \left.\frac{du}{dT}\right|_v = 2\gamma T + 4\alpha T^3$$

Quindi

$$c_v(1\ \mathrm{K}) = 2\gamma + 4\alpha = 1{,}2\times10^{-2}\ \mathrm{J/kg\,K}$$
$$c_v(2\ \mathrm{K}) = 4\gamma + 32\alpha = 2{,}8\times10^{-2}\ \mathrm{J/kg\,K}$$

Risolvendo il sistema si trova

$$\alpha = 1{,}7\times10^{-4}\ \mathrm{J/kgK^4};\ \ \gamma = 5{,}7\times10^{-3}\ \mathrm{J/kgK^2}$$

Esercizio 2

a)

$$E(k) = \varepsilon - \alpha - \sum_R \gamma(R) e^{ikR} = \varepsilon - \alpha - t_1\left(e^{ika} + e^{-ika}\right) - t_2\left(e^{ik2a} + e^{-ik2a}\right) =$$

$$\varepsilon - \alpha - 2t_1 \cos(ka) - 2t_2 \cos(2ka)$$

b) Il numero n di stati, tenendo conto dello spin, è uguale a $2N$. Poiché gli atomi sono monovalenti, la banda è riempita a metà. Quindi la catena è metallica.

c) $k_F = \frac{1}{2}\frac{\pi}{a}$

$$E_F = E(k_F) = \varepsilon - \alpha - 2 \cdot t_1 \cos\left(\frac{1}{2}\frac{\pi}{a}a\right) - 2 \cdot t_2 \cos\left(2\frac{1}{2}\frac{\pi}{a}a\right) = \varepsilon - \alpha + 2t_2 = 1.0 \text{ eV}$$

d)

$$\frac{dE}{dk} = 2at_1 \sin ka + 4at_2 \sin 2ka$$

$$\left.\frac{d^2E}{dk^2}\right|_{k=0} = \left[2a^2 t_1 \cos ka + 8a^2 t_2 \cos 2ka\right]_{k=0} = 2a^2\left(t_1 + 4t_2\right)$$

$$m^* = \frac{\hbar^2}{2a^2\left(t_1 + 4t_2\right)} = \frac{\left(1{,}05 \times 10^{-27}\right)^2}{2 \times 1{,}44 \times 10^{-16} \times 1{,}0 \times 1{,}6 \times 10^{-12}} = 2{,}4 \times 10^{-27} \text{ g}$$