Prova scritta di Materia Condensata del 5 Luglio 2011

Prof. Paolo Calvani – Prof. Mario Capizzi

Esercizio 1

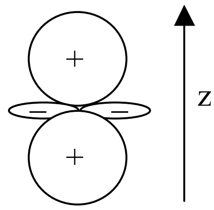
Si assuma che un cristallo di litio metallico venga cresciuto mescolando in uguali proporzioni i due isotopi Li^5 e Li^9. Si ottiene un reticolo cubico semplice, con lato del cubo a, nel quale i due isotopi sono regolarmente alternati nelle tre direzioni dello spazio. La densità del cristallo è ρ = 0,747 g/cm^3. La dispersione della branca acustica triplamente degenere è $\omega_{ac} = \Omega \sin(ka/2)$ e il numero d'onde del fonone ottico a centro zona è $\tilde{\nu}_0$ = 318 cm^{-1}.

1. Ricavare le pulsazioni ottica e acustica a bordo zona, rispettivamente ω_1 e ω_2; dire se si osservano assorbimenti nell'infrarosso ed eventualmente a quali di quelle tre frequenze.
2. Ricavare la velocità del suono v_s.
3. Ricavare la capacità termica a volume costante del solido per unità di volume, C_v, a T = 3 K e a T = 600 K, assumendo che il vettore d'onda di Debye sia $k_D = 1.05\pi/a$ e che, a T = 0,5 K, il contributo degli elettroni di conduzione a C_v sia uguale a quello del reticolo.
   Si ricorda che le pulsazioni a centro e bordo zona sono date da
   $$\omega_0 = \sqrt{2C\left(\frac{1}{M_1}+\frac{1}{M_2}\right)} \quad \omega_1 = \sqrt{\frac{2C}{M_2}}; \quad \omega_2 = \sqrt{\frac{2C}{M_1}};$$
   la massa media di un nucleone è $m = 1{,}67 \times 10^{-24}$ g;
   la capacità termica del reticolo per unità di volume a T<<T_D è $C_v/V = 3\times\frac{4\pi^4}{5} N k_B (T/T_D)^3$ con N = numero di atomi per unità di volume.

Esercizio 2

La banda di conduzione di un solido cristallino di struttura cubica semplice sia ben descritta da una base di orbitali atomici di simmetria d_{z^2} (v. Figura). Limitando l'interazione fra le nuvole elettroniche agli atomi primi vicini e utilizzando l'approssimazione di legame forte nella forma

$$E(\bar{k}) = E_{d_{z^2}} - \beta - \sum_{\bar{R}\in p.v.} \gamma_{\bar{R}} e^{-i\bar{k}\cdot\bar{R}}$$



1) si scriva l'espressione esplicita dell'energia $E(\bar{k})$ nella banda di conduzione;
2) si trovino i punti in cui, nelle direzioni ΓX e ΓR della prima zona di Brillouin [Γ≡ (0,0,0), X≡ (1,0,0), R≡ (1,1,1)], si trovano minimi e/o massimi di $E(\bar{k})$. Classificarli basandosi sul segno e sulla presunta grandezza relativa dei tre integrali di trasferimento γ_x, γ_y e γ_z.
3) si determinino i valori di γ_x, γ_y e γ_z sapendo che, preso come zero dell'energia il minimo assoluto della banda di conduzione, il massimo assoluto della banda vale 16 eV e un secondo massimo, relativo, si ha a 4 eV; si considerino solo le direzioni ΓX e ΓR della prima zona di Brillouin.
4) assimilando gli atomi a sfere rigide, si trovi il massimo fattore di riempimento della struttura cubica semplice.
5) (Solo per gli studenti del Prof. Capizzi): si determinino i valori delle componenti del tensore massa efficace in corrispondenza dei valori minimi e massimi, assoluti e relativi, dell'energia $\varepsilon(\boldsymbol{k})$ trovati al punto 2).
   Facoltativo: commentare il risultato ottenuto per la massa efficace.

$\hbar$=1.055×10^{-34} m^{2}Kg/s; m_0=0.911x10^{-27} g; e =1,6×10^{-19} C; k_B = 1,38x10^{-16} erg·K^{-1}

Esercizio 1-Soluzione

1. La costante elastica si ricava dal valore della pulsazione a centro zona
$\omega_0 = 2\pi c\tilde{v}_0 = 6{,}28\times 3\times 10^{10}\times 318 = \mathbf{6\times 10^{13}}$ **rad/s** ;

$$C = \frac{M_1 M_2 \omega_0^2}{2(M_1+M_2)} = \frac{45\times 1{,}67\times 10^{-24}\times (6\times 10^{13})^2}{28} = 9.7\times 10^3 \ \textbf{dyne/cm}$$

Quindi

$$\omega_1 = \sqrt{\frac{2C}{M_2}} = \sqrt{\frac{2\times 9.7\times 10^3}{5\times 1{,}67\times 10^{-24}}} = \sqrt{0{,}23\times 10^{28}} = 0{,}48\times 10^{14}\ \textbf{rad/s};$$

$$\omega_2 = \sqrt{\frac{2C}{M_1}} = \sqrt{\frac{2\times 9.7\times 10^3}{9\times 1{,}67\times 10^{-24}}} = \sqrt{0{,}13\times 10^{28}} = 0{,}36\times 10^{14}\ \textbf{rad/s}.$$

Non si osservano assorbimenti nell'infrarosso nelle branche acustiche e neppure a $\tilde{v}_0$, dato che le nuvole elettroniche dei due isotopi sono identiche e quindi nella vibrazione non si genera momento di dipolo.

2. v_s si ottiene derivando la legge di dispersione a k=0, osservando che

$$\omega_{ac}\Big|_{k=\pi/a} = \omega_2 = \boldsymbol{\Omega}\sin\left(\frac{ka}{2}\right)\Big|_{k=\pi/a} = \boldsymbol{\Omega}; \qquad \rho = \frac{(5+9)/2\times 1{,}67\times 10^{-24}}{a^3} \text{ e quindi}$$

$$a = \sqrt[3]{\frac{7\times 1{,}67\times 10^{-24}}{0{,}747}} = 2{,}50\times 10^{-8}\ \text{cm. Derivando,}$$

$$v_s = \frac{d\omega_{ac}}{dk}\Big|_{k=0} = \omega_2\frac{a}{2}\cos\left(\frac{ka}{2}\right)\Big|_{k=0} = 0{,}36\times 10^{14}\times\frac{1}{2}\times 2{,}5\times 10^{-8} = 4.5\times 10^5\ \textbf{cm/s}$$

3. Calcoliamo prima il contributo del reticolo. Si ha

$$N = \frac{1}{a^3} = 6{,}4\times 10^{22}\ \text{at/cm}^3;$$

$$T_D = \frac{\hbar\omega_D}{k_B} = \frac{\hbar v_s k_D}{k_B} = \frac{1.05\times 10^{-27}\times 4.5\times 10^5\times 1.32\times 10^8}{1{,}38\times 10^{-16}} = 452\ \mathbf{K};$$

quindi a 3 K $T \ll T_D$ e si può usare la formula di Debye per basse temperature:

$$\frac{C_v}{V}\Big|_{ret} = \frac{12\pi^4}{5}\times 6{,}4\times 10^{22}\times 1{,}38\times 10^{-16}\left(\frac{3}{452}\right)^3 = 6.0\times 10^2\ \text{erg/Kcm}^{\mathbf{3}}\cdot$$

Il contributo degli elettroni di conduzione a 3 K è 6 volte più grande che a T = 0,5 K, e questo a sua volta è uguale a quello reticolare a 0,5 K. Perciò

$$\frac{C_v}{V}\Big|_{el} = 6\times\frac{C_v}{V}\Big|_{ret,0,5K} = 6\times\frac{C_v}{V}\Big|_{ret,3K}\left(\frac{1}{6}\right)^3 = 6\times 56\times 10^2\times\left(\frac{1}{6}\right)^3 = 15.5\ \text{erg/Kcm}^3\cdot$$

Quindi, a 3K,

$$\frac{C_v}{V}\Big|_{totale} = \frac{C_v}{V}\Big|_{ret} + \frac{C_v}{V}\Big|_{el} = 615\ \text{erg/Kcm}^3\cdot$$

A 600 K, $T \gg T_D$; si può usare la formula classica per *N* oscillatori armonici e si può trascurare il contributo degli elettroni. Quindi,

$$\frac{C_v}{V} = 3Nk_B = 3\times 6{,}4\times 10^{22}\times 1{,}38\times 10^{-16} = 2{,}7\times 10^7\ \text{erg/Kcm}^3$$

Esercizio 2-Soluzione

1) $E(\bar{k}) = E_{d_{z^2}} - \beta - \sum_{R \in p.v.} \gamma_{\bar{R}} e^{-i\bar{k}\cdot\bar{R}} = E_{d_{z^2}} - \beta - 2\gamma_x \cos k_x a - 2\gamma_y \cos k_y a - 2\gamma_z \cos k_z a$

con

$$\gamma_z = -\int d\bar{r}\psi^*(\bar{r})\Delta U(\bar{r})\psi(\bar{r} - a\hat{z})$$
$$\beta = -\int d\bar{r}|\psi(\bar{r})|^2 \Delta U(\bar{r})$$

Dal segno e dalla forma degli orbitali risulta evidente che $0 < \gamma_x = \gamma_y < \gamma_z$

2) da quanto visto prima, risulta evidente che il minimo dell'energia si ha per ***k***=0, e due massimi si hanno per ***k*** = π/a(1,0,0) (massimo relativo) e ***k*** = π/a (1,1,1) (massimo assoluto).

3)
$$E\left[\bar{k} = \frac{\pi}{a}(0,0,0)\right] = E_{d_{z^2}} - \beta - 4\gamma_x - 2\gamma_z = 0$$

$$E\left[\bar{k} = \frac{\pi}{a}(1,0,0)\right] = E_{d_{z^2}} - \beta + 2\gamma_x - 2\gamma_y - 2\gamma_z = 0 + 4\gamma_x = 4 \text{ eV}$$
$$\gamma_x = 1 \text{ eV}$$

$$E\left[\bar{k} = \frac{\pi}{a}(1,1,1)\right] = E_{d_{z^2}} - \beta + 4\gamma_x + 2\gamma_z = 0 + 8\gamma_x + 4\gamma_z = 16 \text{ eV}$$
$$\gamma_z = 2 \text{ eV}$$

4) Se a ogni vertice c'e' una sfera rigida in contatto con le sfere rigide sui vertici contigui, ognuna delle 8 sfere occuperà per un ottavo la cella unitaria, per cui il fattore di riempimento sara' dato da

$$\frac{8 \times \frac{1}{8} \times \frac{4\pi}{3}\left(\frac{a}{2}\right)^3}{a^3} = \frac{\pi}{6} = 0.52$$

5) Le componenti del tensore della massa efficace sono date da

$$m_{\alpha\beta} = \hbar^2 \left[\frac{\partial^2 E(\bar{k})}{\partial k_\alpha \partial k_\beta} \right]^{-1}$$

A $\boldsymbol{k}$ = 0 si ha

$$m_{xx} = m_{yy} = \frac{\hbar^2}{2a^2\gamma_x} = \frac{\left(1.05\times10^{-34}\right)^2}{2\times\left(3\times10^{-10}\right)^2\times1\times1.602\times10^{-19}} = 3.8\times10^{-31}kg = 0.41m_0$$

MINIMO

$$m_{zz} = \frac{\hbar^2}{2a^2\gamma_z} = 1.9\times10^{-31}kg = 0.21m_0$$

$$m_{xy} = m_{yx} = m_{yz} = m_{zy} = m_{xz} = m_{zx} = \infty$$

A $\boldsymbol{k}$ = π/a(1,1,1) si ha

$$m_{xx} = m_{yy} = -\frac{\hbar^2}{2a^2\gamma_x} = -3.8\times10^{-31}kg = -0.41m_0$$

MASSIMO

$$m_{zz} = -\frac{\hbar^2}{2a^2\gamma_z} = -1.9\times10^{-31}kg = -0.21m_0$$

$$m_{xy} = m_{yx} = m_{yz} = m_{zy} = m_{xz} = m_{zx} = \infty$$

A $\boldsymbol{k}$ = π/a(1,0,0) si ha

$$m_{xx} = -\frac{\hbar^2}{2a^2\gamma_x} = -3.8\times10^{-31}kg = -0.41m_0$$

$$m_{yy} = +\frac{\hbar^2}{2a^2\gamma_x} = +3.8\times10^{-31}kg = +0.41m_0$$

PUNTO SELLA

$$m_{zz} = +\frac{\hbar^2}{2a^2\gamma_z} = +1.9\times10^{-31}kg = +0.21m_0$$

$$m_{xy} = m_{yx} = m_{yz} = m_{zy} = m_{xz} = m_{zx} = \infty$$

ovvero nella direzione (100) si ha un massimo a bordo zona ($x=\pi/a$) nella direzione x e un minimo nelle direzioni y e z (motivo per cui si parla di punto sella). Nel caso del bordo zona nella direzione y il massimo si ha nella direzione y, i minimi nelle direzioni x e z, e cosi' via.