

FI 104 - Prova 4

Problem 1: Factor of Debye-Waller

Consider the scattering intensity of a crystal in a x-rays diffraction experiment:

$$I \propto \langle f f^* \rangle$$

where

$$f = \sum_n f_{at}(\vec{q}) e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_n}$$

and the sum is over all the atoms of the crystal, f_{at} is the atomic factor and \vec{R}_n are the static (average) atom positions. Consider the dynamical situation writting

$$\vec{R}_n \rightarrow \vec{r}_n = \vec{R}_n + u_n$$

Using the theorem of Baker-Hausdorff (prove it!) show that

$$\begin{aligned} I &\propto \sum_n \sum_m f_{at}(\vec{q}) e^{-\frac{1}{2}q^2 \langle u_{qm}^2 \rangle} e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_m} f_{at}^*(\vec{q}) e^{-\frac{1}{2}q^2 \langle u_{qn}^2 \rangle} e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_n} \\ &+ \sum_m \sum_n f_{at}(\vec{q}) e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_m} f_{at}^*(\vec{q}) e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}_n} \left\{ e^{q^2 \langle u_{qm} u_{qn} \rangle} - 1 \right\} \end{aligned}$$

where u_{qm} is the component of \vec{u}_m along the direction of \vec{q} . The first term is the usual elastic scattering with an additional factor, the Debye-Waller factor,

$$e^{-\frac{1}{2}q^2 \langle u_q^2 \rangle} = e^{-2W}$$

- (a) Discuss why we should expect a diffraction peak without a broadening. What is the effect of the Debye-Waller factor?
- (b) Calculate the Debye-Waller factor for a cubic monoatomic lattice. Consider the quadratic (harmonic) approximation for the elasticity of the crystal. You may calculate it classically, following the development performed at the Chaikin & Lubensky (see section 6.4.4) or quantically (suggestion: start with section 4.5.7 of L. Kantorovich, **Quantum Theory of the Solid State: An Introduction**, Springer (2004)). Show that for high temperatures,

$$W \propto (h^2 + k^2 + l^2)T$$

where (h, k, l) are the Miller indices for the scattering and T is the temperature.

(c) Give a physical interpretation of the second term.

*Problema 2: Teoria de elasticidade (optativo)

Considere um poço quântico pseudo-mórfico de $GaAs - In_xGa_{1-x}As - GaAs$. Considere $x = 0, 15$. Essencialmente, considere o sistema como sendo 50 de $In_xGa_{1-x}As$ e camadas semi-infinitas de $GaAs$ de forma que o parâmetro de rede no plano em toda a heteroestrutura é o do $GaAs$. O parâmetro de rede do $GaAs$ é $a = 5,6419$ e do $InAs$ é $a = 6,0584$. Para a liga, considere uma interpolação linear. Considere a descrição das bandas de valência no ponto $\Gamma(\vec{k}) = (0, 0, 0)$ como sendo dado pelo Hamiltoniano de Luttinger-Kohn (aproximação $\vec{k} \cdot \vec{p}$):

$$\mathcal{H}_{LK} = \begin{bmatrix} H_{hh} & b & c & \\ b^* & H_{lh} & & c \\ c^* & 0 & H_{lh} & -b \\ & c^* & -b^* & H_{hh} \end{bmatrix}$$

onde

$$\begin{aligned} H_{hh} &= \frac{\hbar^2}{2m_0} [(\gamma_1 + \gamma_2)(k_x^2 + k_y^2) + (\gamma_1 - 2\gamma_2)k_z^2] \\ H_{lh} &= \frac{\hbar^2}{2m_0} [(\gamma_1 - \gamma_2)(k_x^2 + k_y^2) + (\gamma_1 + 2\gamma_2)k_z^2] \\ b &= -\frac{\sqrt{3}i\hbar^2}{m_0} \gamma_3 (k_x - ik_y) k_z \\ c &= \frac{\sqrt{3}\hbar^2}{2m_0} [\gamma_2(k_x^2 - k_y^2) - 2i\gamma_3 k_x k_y] \end{aligned}$$

onde a base de estados é

$$\begin{aligned} |\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle &= \frac{-1}{\sqrt{2}} |p_x + ip_y, \uparrow\rangle \\ |\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle &= -\frac{1}{\sqrt{6}} [|p_x + ip_y, \downarrow\rangle - 2|p_z, \uparrow\rangle] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}} [|p_x - ip_y, \uparrow \rangle + 2 |p_z, \downarrow \rangle] \\ \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} |p_x - ip_y, \downarrow \rangle \end{aligned}$$

O hamiltoniano de energia elástica para os elétrons de valência é

$$\mathcal{H}_\varepsilon^{\alpha\beta} = \sum_{ij} D_{ij}^{\alpha\beta} \varepsilon_{ij}$$

onde

$$\mathcal{H}_\varepsilon^{\alpha\beta} = \langle p_\alpha | \mathcal{H}_\varepsilon | p_\beta \rangle = \sum_{ij} D_{ij}^{\alpha\beta} \varepsilon_{ij}, \text{ etc...}$$

$$\begin{aligned} D_{xx}^{xx} &= l \\ D_{yy}^{xx} &= m \\ D_{xy}^{xy} &= n \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} a &= \frac{l+2m}{3} \\ b &= \frac{l-m}{3} \\ d &= \frac{n}{\sqrt{3}} \end{aligned}$$

$a = -9, 77(-6)$, $b = -1, 7(-1, 8)$ e $d = -4, 55(-3, 6)$ para o $GaAs$ ($InAs$).

- (a) Utilize a simetria da rede blenda de zinco e encontre o hamiltoniano de tensão na mesma base do hamiltoniano de Luttinger (esse é o hamiltoniano de Bir-Pikus) em termos de a, b, d .
- (b) Calcule o valor do tensor de deformação no In_xGa_xAs .
- (c) Qual o grupo pontual de simetria do In_xGa_xAs tensionado? Calcule a separação em energia entre os estados de valência em $\vec{k} = (0, 0, 0)$ induzidos pela tensão e discuta o resultado em termos da simetria.
- (d) A energia elástica é dada por

$$E_{el} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \int d\vec{r} \epsilon_\alpha C_{\alpha\beta} \epsilon_\beta$$

onde escrevemos os tensores na forma reduzida de um espaço de dimensão-6 com $\alpha \rightarrow ij$ para a rede cúbica. $C_{11} = 11,88(8,329)$, $C_{12} = 5,38(4,526)$ e $C_{44} = 5,94(3,959)$ em unidades de $10^{11} \text{dynes/cm}^2$. (esses valores são para o *GaAs*; utilize-os para o *InAs* também).

Calcule a energia elástica acumulada em uma célula unitária do $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. Expresse em *eV*.

(e) Calcule a energia elástica acumulada por unidade de área acumulada no $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ considerando que $L = 10 \text{ nm}$ onde L é a largura da camada de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. Discuta a estabilidade da estrutura pseudo-mórfica a luz desse valor.