

Fisica della Materia Condensata.

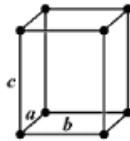
Prof. Paola Gallo.

Prova del I appello di esame - 28 Gennaio 2025

Istruzioni - Esame completo: svolgere tutti e quattro gli esercizi in quattro ore. Recupero del primo esonero: svolgere gli esercizi 1 e 2 in due ore. Secondo esonero: risolvere gli esercizi 3 e 4 in due ore.

1 Esercizio 1

Si abbia un cristallo con struttura ortorombica e base monoatomica. Siano $a = 1.7\text{\AA}$ e $b = 2.5\text{\AA}$ due dei parametri reticolari.



1. Studiare il fattore di struttura. (5)
2. Determinare il volume del cristallo se l'angolo a cui si osserva il primo picco di diffrazione per raggi X di lunghezza d'onda $\lambda = 0.20$ nm vale $\theta = 35.3$. (5)
3. Studiare il fattore di struttura se il cristallo ha base biatomica e il secondo atomo si trova in $d_2=1/2(b,a,c)$. (5)

2 Esercizio 2

Si abbia un cristallo bidimensionale quadrato con base biatomica i cui atomi siano liberi di vibrare in due dimensioni. Il parametro reticolare vale $a = 2.0\text{\AA}$. Le relazioni di dispersione delle branche fononiche sono date da

$$\omega_{AL/AT} = \omega_{AL/AT}^0 \sin\left(\frac{qa}{2}\right)$$

con $\omega_{AL}^0 = 2.2 \cdot 10^{12}$ rad/s e $\omega_{AT}^0 = 4 \cdot 10^{12}$ rad/s, e la relazione di dispersione per la banda ottica ha un valore circa costante pari a $1.1 \cdot 10^{13}$ rad/s.

1. Disegnare in forma schematica le curve di dispersione fononica nella Prima Zona di Brillouin. (5 punti)
2. Determinare la velocità del suono. (5 punti)
3. Determinare quanto vale la capacità termica per unità di volume a $T = 400$ K. (5)

3 Esercizio 3

Si consideri una catena lineare monoatomica di passo a , e lunghezza L , composta da N atomi monovalenti e disposta lungo l'asse x . Nell'approssimazione di tight-binding, trascurando gli integrali di sovrapposizione α e β e date $E_{0s} = 1eV$, $E_{0px} = 3.5eV$, $|\gamma_s| = 1eV$ e $|\gamma_{px}| = 0.5eV$, si chiede di:

1. Ricavare l'espressione esplicita delle due bande in funzione di k , considerando solo l'interazione a primi vicini. Graficare le due bande nella prima zona di Brillouin. (5)
2. Determinare il valore del k di Fermi e dell'energia di Fermi, e determinare se il sistema ha comportamento metallico o isolante. (5)
3. Determinare come cambiano il k di Fermi e il comportamento della catena se gli atomi sono bivalenti. (5)

4 Esercizio 4

Un semiconduttore è drogato di tipo n con densità degli atomi donori $N_D = 3.1 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-3}$. L'energia di ionizzazione degli atomi donori vale $\epsilon_d = 15 \text{ meV}$. L'energia di gap del semiconduttore vale $E_G = 0.75eV$. La massa degli elettroni di conduzione vale $m_e^* = 3 \cdot 10^{-30} \text{ Kg}$. La densità dei portatori di carica a 400K vale $n(400) = 2.1 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$.

1. Calcolare la densità di elettroni nella banda di conduzione a 10 K. (5)
2. Determinare con precisione in che regime si il semiconduttore a 250K e calcolare con precisione la densità dei portatori di carica. (5)
3. Determinare la mobilità degli elettroni e delle lacune a 400K, date una misura di conducibilità $\sigma = 1.3 \cdot 10^{-3} \Omega^{-1} m^{-1}$ e una misura della costante di Hall $R_H = -2.2 \cdot 10^3 m^3/C$. (5)

$K_B = 8.6167 \cdot 10^{-5} \text{ eV K}^{-1}$, $h = 4.136 \cdot 10^{-15} \text{ eV s}$, $1 \text{ J} \cdot 1m^{-2} \cdot 1s^2 = 1Kg$, $1 \text{ eV} = 1.6 \cdot 10^{-19} J$.

5 Soluzioni

5.1 Esercizio 1

1. Il fattore di struttura di un cristallo è definito come

$$F(\vec{G}) = N \sum_i f_i(\vec{G}) \exp(-i \vec{G} \cdot \vec{d}_i)$$

con $\vec{G} = h \vec{g}_1 + k \vec{g}_2 + l \vec{g}_3$ generico vettore del reticolo reciproco e \vec{d}_i vettore di base. In questo caso la base è monoatomica e si ha $\vec{d}_i = \vec{d}_1 = \vec{0}$. Di conseguenza

$$F(\vec{G}) = N f_1.$$

Sono permesse le riflessioni da tutti i piani e i picchi avranno tutti la stessa intensità.

2. Essendo tutte le riflessioni permesse, il primo picco è associato al vettore del reticolo reciproco più corto, cioè quello che congiunge due primi vicini.

I vettori primitivi del reticolo diretto sono

$$\vec{t}_1 = b \hat{x}$$

$$\vec{t}_2 = a \hat{y}$$

$$\vec{t}_3 = c \hat{z}$$

Dalla definizione di vettori del reticolo reciproco

$$\vec{g}_1 = 2\pi \frac{\vec{t}_2 \times \vec{t}_3}{\vec{t}_1 \cdot (\vec{t}_2 \times \vec{t}_3)}$$

$$\vec{g}_2 = 2\pi \frac{\vec{t}_3 \times \vec{t}_1}{\vec{t}_1 \cdot (\vec{t}_2 \times \vec{t}_3)}$$

$$\vec{g}_3 = 2\pi \frac{\vec{t}_1 \times \vec{t}_2}{\vec{t}_1 \cdot (\vec{t}_2 \times \vec{t}_3)}$$

si ottengono

$$\vec{g}_1 = \frac{2\pi}{b} \hat{x}$$

$$\vec{g}_2 = \frac{2\pi}{a} \hat{y}$$

$$\vec{g}_3 = \frac{2\pi}{c} \hat{z}$$

Quindi

$$\vec{G}_1 = \vec{g}_3.$$

Dalla condizione di Laue

$$|\vec{G}_i| = 2k \sin\left(\frac{\theta_i}{2}\right)$$

si ottiene

$$|\vec{G}_1| = |\vec{g}_3| = \frac{2\pi}{c} = \frac{4\pi}{\lambda} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad \longrightarrow c = 3.3\text{\AA}.$$

Il volume della cella primitiva vale $14 \cdot 10^{-30} \text{ m}^3$

3. Sia $\vec{G} = h\vec{g}_1 + k\vec{g}_2 + l\vec{g}_3$ generico vettore del reticolo reciproco e \vec{d}_i vettore di base. Se il cristallo ha base biatomica con $\vec{d}_1=(0,0,0)$ e $\vec{d}_2 = \vec{d}_2=1/2(b,a,c)$ e i due atomi hanno lo stesso fattore di forma allora il fattore di struttura vale:

$$F(\vec{G}) = Nf(1 + \exp(-i\pi(h+k+l))).$$

Quindi sono permesse le riflessioni da tutti i piani con $h+k+l=2n$ (ossia numero pari), mentre la riflessione è nulla per $h+k+l=2n+1$ (numero dispari). Se il fattore di forma dei due atomi di base è diverso, allora il fattore di struttura non si annulla mai e tutte le riflessioni sono permesse.

5.2 Esercizio 2

1. Il reticolo è bidimensionale e si muove in due dimensioni. Essendoci due atomi di base, si osservano sia le bande fononiche acustiche: una longitudinale, l'altra trasversale che la banda ottica. A bordo zona la branca trasversale si trova più in alto di quella longitudinale ($\omega_{AT}^0 > \omega_{AL}^0$)
2. Date le relazioni di dispersione delle branche acustiche, si ha

$$v_s^L = \left. \frac{d\omega_{AL}}{dq} \right|_{q=0} = \omega_{AL}^0 \frac{a}{2} = 2.2 \cdot 10^4 \text{ cm/s},$$

$$v_s^T = \left. \frac{d\omega_{AT}}{dq} \right|_{q=0} = \omega_{AT}^0 \frac{a}{2} = 4 \cdot 10^4 \text{ cm/s}$$

3. Per capire che approssimazione si deve usare per calcolare la capacità termica, è necessario calcolare le temperature di Debye $\theta_D^{L,T}$. Dalla formula

$$\hbar\omega_D^{L,T} = K_B\theta_D^{L,T}$$

nell'approssimazione di Debye $\omega_D \simeq v_s q_D$, con q_D vettore d'onda di Debye

$$q_D = \sqrt{4\pi n} = \frac{\sqrt{4\pi}}{a}.$$

Le due temperature di Debye risultano essere

$$\theta_D^L = \frac{\hbar \omega_D^L}{K_B} = \frac{\hbar v_s^L q_D}{K_B} = \frac{\hbar v_s^L \sqrt{4\pi}}{K_B a} = 30 \text{ K}$$

$$\theta_D^T = \frac{\hbar \omega_D^T}{K_B} = \frac{\hbar v_s^T q_D}{K_B} = \frac{\hbar v_s^T \sqrt{4\pi}}{K_B a} = 54 \text{ K}.$$

Risulta quindi che $T = 400 \text{ K} \gg \theta_D^{L,T}$ e si può usare l'approssimazione di Dulong-Petit per il limite classico. Data la relazione di dispersione ottica costante e uguale a $\omega_{OT} = 1.2 \cdot 10^{13} \text{ rad/s}$, si stima la temperatura di Einstein θ_E

$$\theta_E = \frac{\hbar \omega_{OT}}{K_B} = 91 \text{ K}.$$

Quindi $T = 400 \text{ K} \gg \theta_D^{L,T}, \theta_E$ e si è nel caso di alte temperature dove tutti i modi sono attivati

$$c_v = 2n K_B + 2n K_B = 2.7 \text{ erg / K cm}^2.$$

5.3 Esercizio 3

1. In approssimazione di Tight Binding e con α e β trascurabili, e per approssimazione a primi vicini dove i primi vicini in una catena lineare di passo a sono $R = \pm a$, l'espressione della struttura a bande si semplifica in:

$$E_i(k) = E_{0i} - 2 \cdot |\gamma_i| \cdot \cos(ka)$$

Essendo l'orbitale di sovrapposizione per l'orbitale s $\gamma_s > 0$ e quello per l'orbitale p $\gamma_p < 0$, la struttura a bande per s e p_z è data da:

$$E_s(k) = E_{0s} - 2 \cdot |\gamma_s| \cdot \cos(ka)$$

$$E_p(k) = E_{0p} + 2 \cdot |\gamma_p| \cdot \cos(ka).$$

I valori a centro zona ($k = 0$) e a bordo zona ($k = \pm \frac{\pi}{a}$) di Brillouin sono:

$$E_{0s}(0) = -1eV$$

$$E_{0s}(\pm \frac{\pi}{a}) = 3eV$$

$$E_{0p}(0) = 4.5eV$$

$$E_{0p}(\pm \frac{\pi}{a}) = 2.5eV.$$

2. Poichè le bande s e p_x sono sovrapposte in energia, allora occorre verificare se nel caso di atomi monovalenti la banda s sarà parzialmente piena e quella p vuota. Per determinare il k_F osserviamo che il numero di k permessi compresi tra $-k_F < k < k_F$ deve uguagliare il numero di elettroni totali nel sistema. Essendo la catena monoatomica e monovalente il numero di elettroni di valenza è uguale al numero N di atomi nella catena. Pertanto dal rapporto tra il volume occupato dai valori di k permessi ($2k_F$)

e il volume di uno stato k ($V = 2\pi/L$) e considerando la degenerazione di spin otteniamo:

$$2 \cdot \frac{2k_F}{2\pi/Na} = N \longrightarrow k_F = \frac{\pi}{2a}.$$

e dunque il k_F è più piccolo del valore per cui le due bande si intersecano, quindi la banda s sarà parzialmente piena e quella p vuota. L'energia di Fermi vale: $E_F = E_S(k_F) = 1eV$ e il comportamento è metallico.

3. Se gli atomi sono bivalenti, allora il numero di elettroni di valenza è uguale al numero $2N$, quindi $k_F = \frac{\pi}{a}$. Le due bande si intersecano. Pertanto per atomi bivalenti entrambe le bande saranno parzialmente piene. Occorre trovare il nuovo valore del k_F per determinare per quali k sono occupate le due bande.

Il nuovo k_F si determina imponendo le condizioni:

$$E_s(k_1) = E_p(k_2)$$

$$2 \cdot \frac{2k_1 + 2(\frac{\pi}{a} - k_2)}{\frac{2\pi}{Na}} = 2N \longrightarrow k_1 = k_2.$$

pertanto, il k_F è proprio quello in cui si intersecano le due bande, che si ottiene eguagliando $E_s(k_F) = E_p(k_F)$, ottenendo $k_F \simeq 2.5/a$. La banda s sarà occupata per $0 < k < k_F$ e la banda p per $k_F < k < \frac{\pi}{a}$. L'energia di Fermi vale: $E_F = E_S(k_F) = 2.6eV$ e il comportamento è metallico.

5.4 Esercizio 4

1. All'energia di ionizzazione del semiconduttore associamo una temperatura di ionizzazione $T_D = \epsilon_D/K_B = 174K$. Quindi a $T = 10K$ il semiconduttore si trova nel regime a basse temperature, verificheremo alla fine che ha comportamento estrinseco. In questo regime la densità di portatori maggioritari è

$$n(T) = \sqrt{\frac{N_D N_C(T)}{2}} e^{-\frac{\epsilon_d}{2K_B T}}$$

con

$$N_C(T) = \frac{1}{4} \left(\frac{2m_c^* K_B T}{\pi \hbar^2} \right)^{3/2}.$$

A $T = 10K$ si ottiene

$$n(10K) = 2 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-3}.$$

La densità dei portatori è un ordine di grandezza più piccolo di N_D quindi confermiamo di essere nella regione di freezin out.

2. A $T = 400K$ il semiconduttore si trova in regime intrinseco, infatti la densità di portatori intrinseci è molto maggiore della densità del drogaggio $N_D = 3.2 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-3}$. La densità degli elettroni in regime intrinseco $n_i(T)$ ha una dipendenza dalla temperatura T del tipo

$$n_i(T) \sim T^{3/2} e^{-\frac{E_G}{2k_B T}}.$$

Sfruttando la conoscenza dell'energia di gap E_G , otteniamo la densità di portatori intrinseci a $T = 250K$.

$$n_i(250 \text{ K}) = n_i(400 \text{ K}) \left(\frac{250 \text{ K}}{400 \text{ K}} \right)^{3/2} \exp \left[-\frac{E_G}{2k_B} \left(\frac{1}{250 \text{ K}} - \frac{1}{400 \text{ K}} \right) \right].$$

Da cui si ottiene $n_i(250K) = 2 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-3}$, dello stesso ordine di grandezza di N_D , quindi il sistema si trova nella zona di transizione tra regime di saturazione e regime intrinseco. I portatori intrinseci e donori contribuiscono similmente al numero totale di elettroni in banda di conduzione. La densità di portatori di carica a si ricava combinando $n(T) = p(T) + N_D$ e l'equazione d'azione di massa $n(T) \cdot p(T) = n_i^2(T)$, da cui:

$$n(250K) = N_D/2 + \sqrt{(N_D/2)^2 + n_i^2(250K)} = 4 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-3}$$

3. Poichè a $T = 400K$ siamo in regime intrinseco, la conducibilità può essere scritta: $\sigma(400K) = n_i(400K) \cdot e \cdot (\mu_n + \mu_p)$, dove μ sono le mobilità dei portatori di carica, e la costante di Hall può essere scritta:

$$R_H(400K) = \frac{1}{n_i(400K)e} \frac{\mu_p - \mu_n}{\mu_p + \mu_n}.$$

Possiamo quindi ricavare la mobilità degli elettroni, $\mu_n = 1.5 \text{ m}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ e delle lacune $\mu_p = -1.5 \text{ m}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$.