

Fisica della Materia Condensata.
Prova del II appello di esame - 10 Febbraio 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

Un cristallo AB cristallizza in una struttura cubica semplice di parametro reticolare 0.36 nm . L'atomo A si trova in $(0,0,0)$, l'atomo B si trova in $-1/2(1,1,1)$. Il fattore di forma dell'atomo A vale il doppio dell'altro. Il cristallo viene studiato col metodo delle polveri, con lunghezza d'onda della radiazione incidente 0.2 nm .

1. Studiare il fattore di struttura del cristallo. (5 punti)
2. Determinare l'angolo al quale si osserva il terzo picco di diffrazione. (5 punti)
3. Determinare se si osserva diffrazione all'angolo determinato al punto precedente se i due atomi hanno lo stesso fattore di struttura. (5 punti)

2 Esercizio 2

Si consideri una catena lineare monoatomica disposta lungo l'asse \hat{x} e libera di muoversi nel piano $\hat{x}\hat{y}$. Sia $a = 1.5 \text{ \AA}$ il parametro reticolare e $\rho = 6 \text{ u.m.a. \AA}^{-1}$ la densità lineare. Siano dati i valori delle branche acustiche a bordo zona $\omega_{AL} = 1.55 \cdot 10^{13} \text{ rad/s}$ e $\omega_{AT} = 0.63 \cdot 10^{13} \text{ rad/s}$.

1. Quante branche e di che tipo sono presenti? Disegnare le curve di dispersione dei fononi nella Prima Zona di Brillouin. Che tipo di branche si avrebbero se il cristallo fosse biatomico? (5 punti)
2. Determinare la velocità del suono. (5 punti)
3. Determinare la capacità termica per unità di volume a $T_1 = 20 \text{ K}$ e a $T_2 = 350 \text{ K}$. (5 punti)

3 Esercizio 3

Un cristallo bidimensionale con reticolo quadrato nel piano x-y e di passo $a = 3.5 \text{ \AA}$, contiene N^2 atomi monovalenti con orbitale di valenza di tipo s . Utilizzando il modello del legame forte (*tight binding*), limitando l'interazione ai primi vicini e trascurando l'integrale di sovrapposizione α ,

$$E(\vec{k}) = E - \beta - \sum_{\vec{R}} \gamma(R) e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}}.$$

Si risponda alle seguenti domande:

1. Determinare l'espressione della banda $E(\vec{k})$, sapendo che l'integrale di sovrapposizione che compare nell'espressione della banda è $|\gamma| = 0.35 \text{ eV}$ e che $E - \beta = 1.6 \text{ eV}$. (5 punti)
2. Determinare l'ampiezza della banda considerando il punto $(0,0)$ e i vertici della prima zona di Brillouin. (5 punti)
3. Determinare se a $T = 0 \text{ K}$ gli stati sul perimetro della zona di Brillouin sono occupati. (5 punti)

4 Esercizio 4

Si abbia un semiconduttore drogato la cui costante di Hall vale $R_H = 2 \text{ C}^{-1} \text{ m}^3$ in una certa regione di temperature. Le masse efficaci di elettroni e lacune sono uguali tra loro ed indipendenti dalla temperatura. L'energia della gap vale 0.5 eV .

1. Determinare in che regione si trova il semiconduttore, se è drogato di tipo p o di tipo n e la concentrazione di impurezze. (5 punti)
2. Determinare la temperatura a cui si ha il passaggio da regime intrinseco a regime di saturazione se la densità efficace degli stati della banda di valenza a tale temperatura vale $2 \times 10^{22} \text{ m}^{-3}$. (5 punti)
3. Determinare la densità di portatori minoritari a $T = 250 \text{ K}$. (5 punti)

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

5 Soluzioni

5.1 Esercizio 1

1. In un cristallo cubico semplice i vettori di base del reticolo reciproco sono:

$$\begin{cases} \vec{g}_1 = \frac{2\pi}{a} \hat{x} \\ \vec{g}_2 = \frac{2\pi}{a} \hat{y} \\ \vec{g}_3 = \frac{2\pi}{a} \hat{z} \end{cases}$$

Il generico vettore del reticolo reciproco è

$$\vec{G} = \vec{G}_{hkl} = h\vec{g}_1 + k\vec{g}_2 + l\vec{g}_3 = \frac{2\pi}{a}(h, k, l).$$

La base atomica è

$$\begin{cases} \vec{d}_0 = \vec{d}_A = (0, 0, 0) \\ \vec{d}_1 = \vec{d}_B = -\frac{a}{2}(1, 1, 1). \end{cases}$$

Il fattore di struttura del cristallo è dato da

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

Calcoliamo separatamente i prodotti scalari $\vec{G} \cdot \vec{d}_i$ per i diversi vettori di base.

$$\begin{aligned} \vec{G} \cdot \vec{d}_0 &= 0, \\ \vec{G} \cdot \vec{d}_1 &= \frac{2\pi}{a}(h, k, l) \cdot -\frac{a}{2}(1, 1, 1) = -\pi(h + k + l). \end{aligned}$$

Quindi

$$F(\vec{G}) = N \left[f_A + f_B e^{i\pi(h+k+l)} \right].$$

Dato che $f_B = 2f_A$, si ottiene

$$F(\vec{G}) = Nf_A \left[1 + 2e^{i\pi(h+k+l)} \right] = Nf_A \left[1 + 2(-1)^{(h+k+l)} \right].$$

Il fattore di struttura non si annulla mai, di conseguenza tutte le diffrazioni sono permesse e daranno luogo ad un picco visibile.

2. Dato che tutti i picchi sono visibili, il terzo picco deve essere associato al terzo vettore del reticolo reciproco più corto. I primi tre vettori del reticolo reciproco più corti sono:

$$\begin{aligned} \vec{G}_1 &= \frac{2\pi}{a} \hat{x} = (100) \\ \vec{G}_2 &= \vec{g}_1 + \vec{g}_2 = (110) \\ \vec{G}_3 &= \vec{g}_1 + \vec{g}_2 + \vec{g}_3 = (111). \end{aligned}$$

di lunghezza

$$\begin{aligned}G_1 &= \frac{2\pi}{a} \\G_2 &= \frac{2\pi}{a}\sqrt{2} \\G_3 &= \frac{2\pi}{a}\sqrt{3}.\end{aligned}$$

Dalla formula per la condizione di interferenza costruttiva

$$|\vec{G}_3| = \frac{4\pi}{\lambda} \sin\left(\frac{\theta^{(3)}}{2}\right)$$

si ottiene $\theta = 60^\circ$.

3. Se il fattore di forma è uguale per i due cristalli, allora

$$F(\vec{G}) = Nf_A \left[1 + e^{i\pi(h+k+l)}\right] = Nf_A \left[1 + (-1)^{(h+k+l)}\right].$$

Il fattore di struttura si annulla quando $h+k+l$ è dispari, quindi il terzo vettore di reticolo reciproco più corto non fa diffrazione e dunque all'angolo calcolato al punto precedente non si osserva diffrazione.

5.2 Esercizio 2

1. Dato che la catena è lineare monoatomica e libera di muoversi in due dimensioni, ci saranno solo due branche acustiche: una longitudinale, l'altra trasversale. Se la catena fosse biatomica avremmo sia branche acustiche che branche ottiche.
2. Per trovare la velocità del suono si studia la relazione di dispersione a centro zona (piccoli valori di q)

$$\omega^{L/T}(q) = A_{L/T} \sin\left(\frac{qa}{2}\right) \underset{q \sim 0}{\simeq} A_{L/T} \frac{qa}{2} = v_s^{L/T} q. \quad (1)$$

Poichè conosciamo il valore delle due curve di dispersione fononiche a bordo zona, allora conosciamo A_L e A_T , che corrispondono proprio a tali valori a bordo zona: ω_{AL} e ω_{AT} . Di conseguenza

$$\begin{aligned}v_s^L &= \frac{A_L}{2} a = 1.16 \cdot 10^5 \text{ cm/s}, \\v_s^T &= \frac{A_T}{2} a = 4.7 \cdot 10^4 \text{ cm/s}.\end{aligned}$$

3. Per determinare la capacità termica per unità di volume occorre innanzitutto calcolare la temperatura di Debye del sistema, θ_D , per studiare se

esso si trova a basse o alte temperature rispetto ad θ_D .

Possiamo ricavare la θ_D dalle relazioni:

$$\hbar \omega_D = K_B \theta_D$$

e

$$\omega_D = v_s q_D,$$

dove q_D può essere ottenuto dalla approssimazione di Debye che eguaglia il volume della prima zona di Brillouin a quello di una sfera di raggio q_D . In una dimensione:

$$2q_D = \frac{2\pi}{a} \longrightarrow q_D = \frac{\pi}{a}.$$

Si ottiene quindi

si ha

$$\theta_D^{L,T} = \frac{\hbar \omega_D^{L,T}}{K_B} = \frac{\hbar v_s^{L,T} q_D}{K_B} = \begin{cases} 370 \text{ K} & \text{longitudinale} \\ 150 \text{ K} & \text{trasversale} \end{cases}$$

Dato che $T_1 \ll \theta_D$, la capacità termica per unità di volume può essere calcolata in approssimazione di Debye per entrambi i modi acustici:

$$\frac{C_V(T_1)}{V} = \frac{4}{5} \pi^4 \frac{N}{V} K_B \left(\frac{T_1}{\theta_D} \right)^3, \quad (2)$$

dove N è il numero di atomi nella catena, quindi

$$\frac{N}{V} = \frac{1}{a} \quad (3)$$

Quindi avremo

$$\begin{aligned} \frac{C_V^{TOT}(T_2)}{V} &= \frac{C_V^{AL}(T) + C_V^{AT}(T)}{V} \Big|_{T_1} = \frac{4}{5} \pi^4 \frac{1}{a} K_B T_1^3 \left[\frac{1}{\theta_D^L{}^3} + \frac{1}{\theta_D^T{}^3} \right] = \\ &= 1.8 \cdot 10^{-9} \text{ erg K}^{-1} \text{ cm}^{-1}. \end{aligned}$$

A T_2 si è in regime di alte temperature per la branca trasversale e in Debye per la branca longitudinale, quindi il contributo fononico alla capacità termica possono essere calcolato dalla legge di Dulong-Petit per la branca trasversale e con Debye per quella longitudinale.

$$\frac{C_V(T_2)}{V} = \frac{N}{V} K_B + \frac{4}{5} \pi^4 \frac{1}{a} K_B T_2^3 \left[\frac{1}{\theta_D^L{}^3} \right] = 6.15 \cdot 10^{-7} \text{ erg K}^{-1} \text{ cm}^{-1}.$$

5.3 Esercizio 3

1. Nel reticolo quadrato i primi vicini si trovano nelle posizioni $\vec{R} = (0, \pm a)$ e $\vec{R} = (\pm a, 0)$. Gli orbitali s hanno simmetria sferica, quindi

$$\gamma_y = \gamma_x = |\gamma| = 0.35 \text{ eV}$$

La banda è dunque:

$$E(\vec{k}) = E - \beta - 2|\gamma| \cos(k_x a) - 2|\gamma| \cos(k_y a) = 1.6 - 0.7 \cos(k_x a) - 0.7 \cos(k_y a) \text{ eV}.$$

2. La zona di Brillouin è quadrata. Nei punti richiesti l'energia vale:

$$\begin{aligned} E(0, 0) &= 0.2 \text{ eV} \\ E\left(\pm \frac{\pi}{a}, \pm \frac{\pi}{a}\right) &= 3 \text{ eV}. \end{aligned}$$

L'ampiezza è dunque 2.8 eV.

3. Considerando che $L = Na$, il cerchio di Fermi ha raggio:

$$N^2 = 2 \frac{\pi k_F^2}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2} \quad \rightarrow \quad k_F = \frac{\sqrt{2\pi}}{a}.$$

Poiché sul perimetro una delle due componenti di \vec{k} vale $\frac{\pi}{a} > k_F$, gli stati sul perimetro non sono occupati, ovvero il cerchio di Fermi è tutto interno alla prima zona di Brillouin.

5.4 Esercizio 4

1. Sa costante di Hall non varia con la temperatura allora siamo in regime intermedio, infatti, in generale il coefficiente di Hall è

$$R_H = \frac{1}{q} \frac{p \mu_p^2 - n \mu_n^2}{(p \mu_p + n \mu_n)^2}.$$

Questo è costante solo nel regime di saturazione in cui le densità di portatori non dipendono dalla temperatura. Nel nostro caso abbiamo un semiconduttore drogato di tipo p perché la costante di Hall è positiva e la densità di portatori maggioritari è pari al drogaggio:

$$R_H = \frac{1}{e N_A}.$$

Invertendo di ottiene

$$N_A = \frac{1}{e R_H} = 3 \times 10^{18} \text{ m}^{-3}.$$

2. Dobbiamo determinare la temperatura di passaggio dal regime intermedio di saturazione al regime intrinseco. Dal momento che le masse efficaci dei portatori sono uguali tra di loro e per ogni valore della temperatura, si ha che le densità di portatori sono uguali tra di loro

$$N_C(T) = N_V(T).$$

Dunque alla temperatura di passaggio vale la seguente relazione

$$N_A = \sqrt{N_V(T) N_C(T)} e^{-\frac{E_g}{2k_B T}} = N_V(T) e^{-\frac{E_g}{2k_B T}},$$

che invertita permette di trovare la temperatura di passaggio, $T = 330$ K.

3. Per la legge di azione di massa si ha

$$n(T)p(T) = n_i^2(T) = N_C(T)N_V(T)e^{-\frac{E_g}{k_B T}} = N_V^2(T)e^{-\frac{E_g}{k_B T}}.$$

Dato che le masse dei portatori sono uguali ad ogni temperatura, possiamo trovare $N_V(T = 250$ K) partendo dal valore noto a $T = 330$ K

$$N_V(250 \text{ K}) = N_V(330 \text{ K}) \left(\frac{250 \text{ K}}{330 \text{ K}} \right)^{3/2}.$$

Da questo calcoliamo

$$n_i(T) = N_V(T)e^{-\frac{E_g}{2k_B T}} = 1.2 \times 10^{17} \text{ m}^{-3}.$$

$T = 250$ K si trova nella regione di saturazione, infatti la densità di portatori intrinseci è un ordine di grandezza più piccola della densità di impurezze. Nella regione di saturazione si ha $p(T) = n(T) + N_A$. Utilizzando questa e la legge di azione di massa troviamo la densità di portatori minoritari:

$$p(250 \text{ K}) = \frac{N_A + \sqrt{N_A^2 + 4n_i^2(250 \text{ K})}}{2} = 3 \times 10^{18} \text{ m}^{-3}.$$

Che infatti è uguale a N_A come atteso in regione di saturazione, quindi per i portatori minoritari otteniamo:

$$n(250 \text{ K}) = \frac{4n_i^2(250 \text{ K})}{p(250 \text{ K})} = 4.7 \times 10^{15} \text{ m}^{-3}.$$