

Fisica della Materia Condensata.

Prof. Paola Gallo.

Prova del I appello di esame - 16 Gennaio 2024

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

Siano dati due campioni A e B entrambi con base monoatomica. Uno dei due ha reticolo quadrato di parametro reticolare a e l'altro reticolo rettangolare di parametri reticolari b e c ($b < c$) e fattore di impacchettamento 0.51. I due campioni vengono studiati con una radiazione di lunghezza d'onda $\lambda = 3 \text{ \AA}$. Per il campione A i primi 3 picchi di diffrazione si osservano per angoli pari a 24.2 , 34.5 e 49.57° . Per il campione B i primi 3 picchi di diffrazione si osservano per angoli pari a 30 , 46.9 e 56.7° .

1. Studiare il fattore di struttura dei due reticoli (quadrato e rettangolare) e determinare per entrambi i primi tre vettori di reticolo reciproco che fanno diffrazione. (5 punti)
2. Identificare il tipo di reticolo dei campioni A e B. (5 punti)
3. Determinare i parametri reticolari a , b e c . (5 punti)

2 Esercizio 2

Una catena lineare monoatomica è disposta e libera di muoversi lungo l'asse \hat{x} . Sia $M = 10$ u.m.a. la massa degli atomi nella catena e $\rho = 4.30$ u.m.a. \AA^{-1} la densità lineare di massa e $v_s = 830$ m/s la velocità del suono.

1. Ricavare la relazione di dispersione in approssimazione armonica e per interazione a primi vicini e disegnare le curve di dispersione fononica nella Prima Zona di Brillouin. (5 punti)
2. Determinare la costante di forza della catena, la temperatura di Debye e la capacità termica per unità di volume a $T = 700$ K. (5 punti)

3. Discutere la capacità termica per unità di volume a basse ed alte temperature per una catena lineare biatomica. (5 punti)

3 Esercizio 3

Un reticolo bidimensionale contiene $N_y = 2 \cdot 10^8$ file di atomi disposti lungo l'asse x , separate l'una dall'altra da una distanza $a = 2.0 \text{ \AA}$. Ogni fila contiene $N_x = 3 \cdot 10^8$ atomi monovalenti separati da $a = 2.0 \text{ \AA}$. Il potenziale cristallino a cui sono soggetti gli elettroni quasi liberi vale:

$$U = -U_1 \cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right) - U_2 \cos\left(\frac{2\pi}{a}y\right)$$

dove $U_1 = 1.5 \text{ eV}$, $U_2 = 1 \text{ eV}$.

1. Disegnare la prima zona di Brillouin e indicare i valori del vettore \vec{k} ai bordi zona nelle direzioni (1,0) e (0,1) e calcolarne il valore numerico. (5 punti)
2. Calcolare il valore delle gap che si aprono in corrispondenza dei termini del potenziale cristallino. (5 punti)
3. Determinare il comportamento del il cristallo. (5 punti)

4 Esercizio 4

Un semiconduttore viene drogato con densità di donatori $N_d = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$. L'energia della gap vale $E_G = 0.99 \text{ eV}$, l'energia di ionizzazione dei donatori è pari a $\epsilon_d = 10.5 \text{ meV}$. Le masse efficaci di elettroni e lacune sono uguali ed indipendenti dalla temperatura e pari a $3.7 \cdot 10^{-30} \text{ Kg}$.

1. Il semiconduttore viene posto alla temperatura $T_1 = 10 \text{ K}$, determinare in quale regime si trova il semiconduttore e calcolare la densità di elettroni in banda di conduzione. (5 punti)
2. Il semiconduttore viene successivamente portato a $T_2 = 400 \text{ K}$. Si determini quanti livelli donori sono ionizzati e si calcoli di nuovo la densità di elettroni in banda di conduzione. (5 punti)
3. Si calcoli la conducibilità a $T_3 = 600 \text{ K}$ sapendo che la mobilità degli elettroni è pari a $0.75 \text{ m}^2/\text{Vs}$ e che il tempo di rilassamento degli elettroni è pari a 3 volte quello delle lacune. (5 punti)

1 u.m.a. = $1.67 \cdot 10^{-24} \text{ g}$, $K_B = 8.6167 \cdot 10^{-5} \text{ eV K}^{-1}$, $h = 4.136 \cdot 10^{-15} \text{ eV s}$.

5 Soluzioni

5.1 Esercizio 1

1. Il generico vettore del reticolo reciproco è

$$\vec{G} = \vec{G}_{hk} = h\vec{g}_1 + k\vec{g}_2.$$

Essendo la base monoatomica in entrambi i cristalli, con $\vec{d}_0 = (0, 0)$, il fattore di struttura del cristallo è

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

Essendo il fattore di struttura sempre diverso da zero tutti le riflessioni sono permesse. Ne segue i primi tre picchi di diffrazione sono associati ai moduli dei primi tre vettori di reticolo reciproco più corto. Calcoliamoli per entrambi i reticoli.

Per il reticolo quadrato i vettori di base del reticolo diretto sono:

$$\begin{cases} \vec{t}_1 = a\hat{x} \\ \vec{t}_2 = a\hat{y}. \end{cases}$$

I vettori di base del reticolo reciproco sono:

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

I primi tre vettori di reticolo reciproco in ordine crescente valgono in modulo:

$$\begin{aligned} G_1 &= |\vec{G}_1| = \frac{2\pi}{a}, \\ G_2 &= |\vec{G}_2| = \sqrt{2}G_1, \\ G_3 &= |\vec{G}_3| = 2G_1 \end{aligned}$$

Per il reticolo rettangolare i vettori di base del reticolo diretto sono:

$$\begin{cases} \vec{t}_1 = b\hat{x} \\ \vec{t}_2 = c\hat{y}. \end{cases}$$

I vettori di base del reticolo reciproco sono:

$$\begin{cases} \vec{g}_1 = \frac{2\pi}{b}\hat{x} \\ \vec{g}_2 = \frac{2\pi}{c}\hat{y}. \end{cases}$$

I moduli dei primi tre vettori di reticolo reciproco in ordine crescente sono:

$$\begin{aligned}
G_1 &= |\vec{G}_1| = \frac{2\pi}{c}, \\
G_2 &= |\vec{G}_2| = \frac{2\pi}{b} = \frac{c}{b}G_1, \\
G_3 &= |\vec{G}_3| = \sqrt{\left(\frac{2\pi}{b}\right)^2 + \left(\frac{2\pi}{c}\right)^2} = \sqrt{1 + \left(\frac{c}{b}\right)^2} G_1.
\end{aligned}$$

Il valore di c/b si ottiene sfruttando l'informazione sul fattore di impacchettamento e considerando che in questo caso $R_{max} = b/2$

$$p.f. = \frac{4\frac{1}{4}\pi R_{max}^2}{ab} = \frac{\pi \frac{b^2}{4}}{ab} = \frac{\pi}{4} \frac{b}{c}$$

da cui

$$\frac{c}{b} = \frac{\pi}{4} \frac{1}{0.51} = 1.54$$

Otteniamo quindi

$$\begin{aligned}
G_1 &= \frac{2\pi}{c} \\
G_2 &= 1.54 G_1 \\
G_3 &= 1.84 G_1
\end{aligned}$$

2. Utilizzando la formula per la condizione di interferenza costruttiva

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

calcoliamo i moduli dei primi tre vettori di reciproco associati agli angoli sperimentali:

Per il campione A troviamo

$$\begin{aligned}
G_1 &= \frac{4\pi}{\lambda} \sin\left(\frac{24.2}{2}\right) = 0.42k \\
G_2 &= 1.41 G_1 \\
G_3 &= 2 G_1.
\end{aligned}$$

Per il campione B troviamo

$$\begin{aligned}
G_1 &= \frac{4\pi}{\lambda} \sin\left(\frac{30}{2}\right) = 0.52k \\
G_2 &= 1.54 G_1 \\
G_3 &= 1.84 G_1.
\end{aligned}$$

Dal confronto tra valori sperimentali e teorici troviamo il reticolo del campione A quadrato e quello del campione B rettangolare.

3. Sostituendo il vettore d'onda $k = 2\pi/\lambda$ nei moduli dei vettori G_1 per i due campioni otteniamo le costanti reticolare a e c .

Per il campione A, da

$$|\vec{G}_1| = 0.42 \cdot \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi}{a}$$

si ottiene

$$a = \frac{\lambda}{0.42} = 7.14 \text{ \AA}$$

Per il campione B, da

$$|\vec{G}_1| = 0.52 \cdot \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi}{c}$$

si ottiene

$$c = \frac{\lambda}{0.52} = 5.77 \text{ \AA}$$

e quindi

$$b = \frac{c}{c/b} = 3.75 \text{ \AA}.$$

4. Un campione con reticolo come quello di A ma base biatomica..

5.2 Esercizio 2

1. Per ricavare la relazione di dispersione scriviamo l'equazione del moto in approssimazione armonica e per interazione a primi vicini:

$$M\ddot{u}_n = -C(2u_n - u_{n+1} - u_{n-1}) \quad (1)$$

dove C è la costa di forza tra due atomi e M la massa degli atomi. La soluzione è un'onda piana della forma:

$$u_n = A \exp i(qna - \omega t) \quad (2)$$

sostituendo (2) nell'equazione (1) troviamo la relazione di dispersione:

$$\omega(q) = \sqrt{\frac{4C}{M}} \left| \sin\left(\frac{qa}{2}\right) \right| \quad (3)$$

a centro zona si ha

$$\omega(q)|_{q=0} = 0 \quad (4)$$

a bordo zona si ha

$$\omega(q)|_{q=\pm\frac{\pi}{a}} = \sqrt{\frac{4C}{M}} \left| \sin\left(\pm\frac{\pi}{2}\right) \right| = \sqrt{\frac{4C}{M}} \quad (5)$$

2. La velocità del suono si ottiene dall'andamento lineare della branca acustica a piccoli valori di q :

$$\omega(q \sim 0) \approx \sqrt{\frac{4C}{M}} \left(\frac{qa}{2}\right) = v_s q \quad \longrightarrow \quad v_s = \sqrt{\frac{C}{M}} a \quad (6)$$

e, di conseguenza,

$$C = \frac{M v_s^2}{a^2} = 2 \cdot 10^2 \text{ dyne/cm},$$

dove la costante reticolare a è stata calcolata tramite la densità lineare di massa ρ

$$\rho = \frac{M}{a}.$$

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:

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

Si ottiene quindi

$$\theta_D = \frac{\hbar \omega_D}{K_B} = \frac{\hbar v_s q_D}{K_B} = \frac{\hbar v_s \pi}{K_B a} = 90 \text{ K}.$$

Alla temperatura considerata ci si trova quindi in regime di alte temperature, quindi il contributo fononico alla capacità termica può essere calcolato dalla legge di Dulong-Petit.

$$\frac{C_V(T)}{V} = \frac{N}{V} K_B = \frac{K_B}{a} = 0.55 \cdot 10^{-8} \text{ erg K}^{-1} \text{ cm}^{-1}.$$

3. Se la catena è biatomica oltre agli N modi acustici avremo N modi ottici. A bassa temperatura i modi acustici contribuiscono allo stesso modo che nella catena monoatomica, mentre i modi ottici possono essere trascurati perchè il loro contributo tende a zero secondo il modello di Einstein. Ad alta temperatura sia i modi ottici che quelli acustici saranno attivati e dunque la capacità termica per unità di volume a parità di costante reticolare raddoppierà.

5.3 Esercizio 3

1. Si ha un reticolo quadrato di passo reticolare a . Il rispettivo reticolo reciproco ha la stessa simmetria, è dunque un reticolo quadrato di passo reticolare $\frac{2\pi}{a}$. La prima zona di Brillouin, corrisponde ad un quadrato con lato di $\frac{2\pi}{a} = 3.14 \text{ \AA}^{-1}$. I valori di \vec{k} ai bordi della prima zona di Brillouin nelle due direzioni sono dunque $(\pm 1.57, 0) \text{ \AA}^{-1}$ lungo (1,0) e $(0, \pm 1.57 \text{ \AA}^{-1})$ lungo la direzione (0,1).
2. Nel modello a elettroni quasi liberi, cioè in potenziale periodico debole, le gap si aprono in corrispondenza dei bordi delle varie zone di Brillouin. La loro ampiezza è determinata dall'ampiezza della trasformata di Fourier del potenziale cristallino corrispondente al vettore di reticolo reciproco G_i che corrisponde alla differenza fra i bordi di ciascuna zona (vedi es. 4 della raccolta sulle bande elettroniche). Il vettore che modula il potenziale è $G_1 = \frac{2\pi}{a}$, l'ampiezza delle prime due gap, che si aprono ai bordi della prima zona di Brillouin nelle direzioni k_x e k_y valgono $E_g = U_1 = 1.5 \text{ eV}$ e $E_g = U_2 = 1 \text{ eV}$ rispettivamente.
3. Il vettore d'onda di Fermi si trova contando gli stati elettronici. Indicando con N il numero di elettroni totali del cristallo, si ha:

$$N = 2 \cdot \frac{\pi k_F^2}{\frac{2\pi}{L_x} \frac{2\pi}{L_y}}$$

dove L_x, L_y sono le dimensioni lineari del campione. $L_x = N_x a, L_y = N_y a$ e il numero totale di elettroni è pari a quello dei nodi reticolari, in quanto gli atomi sono monovalenti, $N = N_x N_y$. Si ha dunque:

$$\frac{4\pi^2 N}{N a^2} = 2\pi k_F^2 \quad \rightarrow \quad k_F = \frac{\sqrt{2\pi}}{a} = 1.25 \text{ \AA}^{-1}$$

Il cerchio di Fermi è interamente contenuto nella prima zona di Brillouin, il cristallo si comporta dunque come un conduttore.

5.4 Esercizio 4

1. All'energia di ionizzazione possiamo associare una temperatura di ionizzazione: $K_B T_d = \epsilon_d$:

$$T_d = 122K.$$

Possiamo vedere che a $T_1 = 10K$ siamo a temperature basse per cui il semiconduttore ha comportamento estrinseco. In questo regime il numero di elettroni liberi vale:

$$n(T) = \sqrt{N_C N_d / 2} \exp \left[-\frac{\epsilon_d}{2K_B T} \right].$$

dove

$$N_C(T) = \frac{1}{4} \left(\frac{2m^* K_B T}{\pi \hbar^2} \right)^{3/2} = 1.26 \cdot 10^{18} cm^{-3},$$

da cui si ricava $n(10K) = 1.8 \cdot 10^{13} cm^{-3}$, minore della densità di donori, il risultato ci conferma che siamo in regime estrinseco.

2. A $T_2 = 400K$ abbiamo $T_2 \gg T_d$, quindi ci aspettiamo che tutti i livelli donore siano ionizzati: $N_d^+ = N_d = 10^{14} cm^{-3}$. La concentrazione di portatori intrinseci a questa temperatura può essere stimata usando la legge:

$$n_i(T) = \frac{1}{4} \left(\frac{2K_B T}{\pi \hbar^2} \right)^{3/2} (m_e^* m_p^*)^{3/4} \exp \left[-\frac{E_G}{2K_B T} \right] \quad (7)$$

Conoscendo il valore della gap di energia e la massa efficace di elettroni e lacune otteniamo: $n_i(400K) = 1.85 \cdot 10^{14} cm^{-3}$. Quindi i portatori intrinseci e donori a questa temperatura contribuiscono similmente al numero totale di elettroni in banda di conduzione. Il numero totale di elettroni in banda di conduzione può essere calcolato utilizzando l'equazione del bilancio di carica:

$$n(T_2) = p(T_2) + N_d$$

e l'equazione d'azione di massa:

$$n(T_2) \cdot p(T_2) = n_i^2(T_2)$$

combinandole otteniamo:

$$n(T_2) = N_d/2 + \sqrt{(N_d/2)^2 + n_i^2(T_2)} = 2.4 \cdot 10^{14} cm^{-3}$$

3. Come nel punto precedente ricaviamo $n_i(600K) = 4 \cdot 10^{16} cm^{-3}$ molto maggiore della concentrazione di donori, quindi siamo in regime intrinseco, in tale regime la conducibilità può essere scritta:

$$\sigma(600K) = n_i(600K) \cdot e \cdot (\mu_e + \mu_p) = n_i(600K) \cdot e \cdot (\mu_e + \mu_e/3) = 6400 m^{-1} \Omega^{-1}.$$