

Fisica della Materia Condensata.

Prof. Paola Gallo.

Prova del II appello di esame - 7 Febbraio 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

Un cristallo AB con struttura cubica semplice, di parametro reticolare $a=3.56 \text{ \AA}$ e in cui i due atomi di base sono individuati dai vettori $\vec{d}_A = \vec{0}$ e $\vec{d}_B = -\frac{a}{2}(1, 1, 1)$ viene studiato con il 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 gli angoli a cui si osservano i primi tre picchi di riflessione. (5 punti)
3. Calcolare il fattore di impacchettamento nell'ipotesi in cui i due atomi della base abbiano stesso raggio. (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 $a = 1.3 \text{ \AA}$ il parametro reticolare, $\rho = 5.7 \text{ u.m.a., \AA}^{-1}$ la densità lineare e $\alpha = 8.5 \cdot 10^2 \text{ dyne/cm}$, e $\beta = 2 \cdot 10^2 \text{ dyne/cm}$ le costanti di forza associati al moto lungo \hat{x} e lungo \hat{y} , rispettivamente.

1. Determinare i valori delle branche acustiche a centro e bordo zona e disegnare le curve di dispersione dei fononi nella Prima Zona di Brillouin. (5 punti)
2. Determinare la velocità del suono. (5 punti)
3. Determinare la capacità termica per unità di volume a $T = 350 \text{ K}$, motivando adeguatamente quale approssimazione debba essere usata. (5 punti)

3 Esercizio 3

Si consideri una catena lineare monoatomica, composta da atomi bivalenti, disposta lungo l'asse \hat{y} e di passo reticolare $a = 1.8 \text{ \AA}$. Siano $E_{0,s} = 1.1 \text{ eV}$, $E_{0,p_x} = 3.3 \text{ eV}$, $|\gamma_s| = 0.2 \text{ eV}$, $|\gamma_{p_x}| = 0.35 \text{ eV}$. Si trascurino tutte le altre interazioni.

1. Scrivere la forma esplicita delle bande $E_s(\vec{k})$ e $E_{p_x}(\vec{k})$ in approssimazione di tight binding a primi vicini da funzioni di tipo s e p_x , e disegnare le bande di energia. (5 punti)
2. Determinare se il materiale si comporta come isolante o come conduttore e quanto vale l'energia di Fermi. (5 punti)
3. Determinare nuovamente se il cristallo si comporta come un isolante o come un conduttore se per la banda derivante da orbitali p_x l'interazione a secondi vicini non fosse trascurabile e l'integrale di sovrapposizione tra secondi vicini vale $\gamma_{p_x,2} = 0.15 \text{ eV}$. (5 punti)

4 Esercizio 4

Si abbia un semiconduttore drogato di tipo n per il quale siano note le densità di portatori a cinque distinte temperature: $n(500\text{K})=3.12 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$, $n(600\text{K})=2.41 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$, $n(700\text{K})=1.18 \cdot 10^{15}$, $n(800\text{K})=4.08 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, $n(900\text{K})=1.09 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$.

1. Determinare in che regime si trova il semiconduttore a temperature maggiori di 700K e l'energia della gap del semiconduttore. (5 punti)
2. Determinare in che regime si trova il semiconduttore a $T=600\text{K}$ e trovare la densità del drogaggio. (5 punti)
3. Determinare in che regime si trova il semiconduttore a $T=500\text{K}$. (5 punti)

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

5 Soluzioni

5.1 Esercizio 1

1. In un cristallo cubico 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

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

Assumendo che essendo gli atomi della base diversi, f_B sia diverso da f_A , si ottiene che 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, i primi tre saranno associati ai primi tre vettori del reticolo reciproco in ordine di lunghezza crescente. 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

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

si ottiene

$$\begin{aligned} |\vec{G}_1| &= \frac{2\pi}{a} = \frac{4\pi}{\lambda} \sin\left(\frac{\theta^{(1)}}{2}\right) \\ |\vec{G}_2| &= \frac{2\pi}{a}\sqrt{2} = \frac{4\pi}{\lambda} \sin\left(\frac{\theta^{(2)}}{2}\right) \\ |\vec{G}_3| &= \frac{2\pi}{a}\sqrt{3} = \frac{4\pi}{\lambda} \sin\left(\frac{\theta^{(3)}}{2}\right). \end{aligned}$$

Da cui $\theta_1 = 19^\circ$, $\theta_2 = 44^\circ$, $\theta_3 = 60^\circ$

3. Il fattore di impacchettamento è dato dal rapporto tra il volume occupato dagli atomi nella cella convenzionale cubica nell'approssimazione in cui abbiano forma sferica e siano impenetrabili e il volume totale della cella cubica. Il volume della cella cubica è $V_{cella} = a^3$, mentre per calcolare il volume occupato dagli atomi occorre notare che l'atomo B si trova al centro della cella cubica e ha raggio R , mentre l'atomo A, di raggio R , occupa i vertici del cubo:

$$V_{occ} = 2 \cdot \frac{4}{3}\pi R^3.$$

Poichè la diagonale del cubo vale $\sqrt{3}a = 4R$ otteniamo il fattore di impacchettamento

$$p.f. = \frac{V_{occ}}{V_{cella}} = 0.907.$$

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. Date le relazioni di dispersione

$$\begin{aligned} \omega_{AL}(q) &= \sqrt{\frac{4\alpha}{M}} \left| \sin\left(\frac{qa}{2}\right) \right| \\ \omega_{AT}(q) &= \sqrt{\frac{4\beta}{M}} \left| \sin\left(\frac{qa}{2}\right) \right| \end{aligned}$$

a centro zona si ha

$$\begin{aligned} \omega_{AL}(q)|_{q=0} &= 0, \\ \omega_{AT}(q)|_{q=0} &= 0 \end{aligned}$$

a bordo zona si ha

$$\omega_{AL} = \omega_{AL}(q)|_{q=\frac{\pi}{a}} = \sqrt{\frac{4\alpha}{M}},$$

$$\omega_{AT} = \omega_{AT}(q)|_{q=\frac{\pi}{a}} = \sqrt{\frac{4\beta}{M}}$$

da cui, calcolando la massa M tramite la densità lineare ρ

$$\rho = \frac{M}{a} \quad \longrightarrow \quad M = \rho a = 6 \text{ u.m.a. } \text{\AA}^{-1} \cdot 1.5 \text{\AA} = 9 \text{ u.m.a.}$$

si ottiene a bordo zona: $\omega_{AL} = 1.55 \cdot 10^{13} \text{ rad/s}$ e $\omega_{AT} = 0.63 \cdot 10^{13} \text{ rad/s}$.

2. Per trovare la velocità del suono si studia la relazione di dispersione a centro zona (piccoli valori di q)

$$\omega(q) = A \sin\left(\frac{qa}{2}\right) \underset{q \sim 0}{\simeq} A \frac{qa}{2} = v_s q. \quad (1)$$

Di conseguenza

$$v_s^L = \sqrt{\frac{\alpha}{M}} a = 1.16 \cdot 10^5 \text{ cm/s},$$

$$v_s^T = \sqrt{\frac{\beta}{M}} a = 4.7 \cdot 10^4 \text{ cm/s}.$$

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:

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

Si ottiene quindi

si ha

$$\begin{aligned}\theta_D^{L,T} &= \frac{\hbar \omega_D^{L,T}}{K_B} = \frac{\hbar v_s^{L,T} q_D}{K_B} = \\ &= \frac{\pi \cdot 1.05 \cdot 10^{-27} \text{ erg s}}{1.5 \cdot 10^{-8} \text{ cm} \cdot 1.38 \cdot 10^{-16} \text{ erg K}^{-1}} v_s^{L,T} = \begin{cases} 185 \text{ K} & \text{longitudinale} \\ 75 \text{ K} & \text{trasversale} \end{cases}\end{aligned}$$

Dato che $T \gg \theta_D$, la capacità termica per unità di volume può essere calcolata dalla legge di Dulong-Petit.

$$\frac{C_V(T)}{V} = \frac{2 \cdot N}{V} K_B = \frac{2 \cdot K_B}{a} = 1.84 \cdot 10^{-8} \text{ erg K}^{-1} \text{ cm}^{-1}.$$

5.3 Esercizio 3

1. Dato che l'interazione è limitata a primi vicini e che tali atomi si trovano nelle posizioni $R = \pm a$, si ha che

$$\begin{aligned}E_s(\vec{k}) &= E_{0,s} - \sum_{\vec{R}} \gamma_s e^{-i \vec{k} \cdot \vec{R}} = \\ &= E_{0,s} - \gamma_s (e^{-i k_x a} + e^{i k_x a}) = E_{0,s} - 2 \gamma_s \cos(k_x a).\end{aligned}$$

Procedendo in maniera analoga per la banda associata agli orbitali p_x , si ottiene

$$E_{p_x} = E_{0,p_x} - 2 \gamma_{p_x} \cos(k_x a)$$

La sovrapposizione tra orbitali s è positiva come pure quella tra orbitali p_x , di conseguenza $\gamma_s > 0$ e $\gamma_{p_x} > 0$. Alla fine le bande di energia avranno la forma

$$\begin{aligned}E_s(\vec{k}) &= E_{0,s} - 2 |\gamma_s| \cos(k a), \\ E_{p_x}(\vec{k}) &= E_{0,p_x} - 2 |\gamma_{p_x}| \cos(k a).\end{aligned}$$

Il minimo della banda s si trova a centro zona e il massimo a bordo zona, mentre per la banda p_x si ha il minimo a centro zona e il massimo a bordo zona. In particolare a centro zona ($k = 0$) si hanno i $E_s^{MIN} = 0.7 \text{ eV}$ e $E_{p_x}^{MIN} = 2.6 \text{ eV}$, mentre a bordo zona ($k = \pm \pi/a$) si hanno $E_s^{MIN} = 1.5 \text{ eV}$ e $E_{p_x}^{MAX} = 4 \text{ eV}$. A centro zona la distanza tra le due bande risulta essere $E_{p_x}^{MIN} - E_s^{MIN} = 1.9 \text{ eV}$, mentre a bordo zona $E_{p_x}^{MAX} - E_s^{MAX} = 2.5 \text{ eV}$. Le due bande non si intersecano.

2. Essendo il cristallo composto da atomi bivalenti e la banda s quella a energia più bassa, si ha che tale banda risulta completamente occupata. Il materiale si comporta quindi come un isolante. Dato che gli elettroni riempiono tutta la banda s fino al suo massimo, si ha che l'energia di Fermi corrisponde al valore che l'energia di tale banda assume a bordo zona

$$E_F = E_s(0) = 1.5 \text{ eV}.$$

3. Nella catena lineare i secondi vicini si trovano in $R = \pm 2a$. La banda p_x nell'approssimazione a secondi vicini diventa:

$$\begin{aligned} E_{p_x}(\vec{k}) &= E_{0,p_x} - \gamma_{p_x} (e^{i k a} + e^{-i k a}) - \gamma_{p_x,2} (e^{i 2 k a} + e^{-i 2 k a}) = \\ &= E_{0,p_x} - 2\gamma_{p_x} \cos(k a) - 2\gamma_{p_x,2} \cos(2 k a) = \\ &= E_{0,p_x} - 2|\gamma_{p_x}| \cos(k a) - 2|\gamma_{p_x,2}| \cos(2 k a) \end{aligned}$$

Per la banda p_x si ha di nuovo il massimo a bordo zona e il minimo a centro zona. A centro zona ($k = 0$) si ha $E_{p_x}^{MIN} = 2.3 \text{ eV}$, mentre a bordo zona ($k = \pm\pi/a$) si ha $E_{p_x}^{MAX} = 3.7 \text{ eV}$. Anche questa volta le due bande non si intersecano. Il cristallo si comporta ancora come un isolante.

5.4 Esercizio 4

1. Nel regime ad alta temperatura possiamo ipotizzare di essere nel regime intrinseco, in questo regime ci si aspetta un andamento lineare del logaritmo di n in funzione dell'inverso della temperatura, la cui pendenza è data dall'energia della gap, procediamo dunque a calcolare l'energia della gap tra 900K e 800K e tra 800K e 700K per verificare la nostra ipotesi.

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

Conoscendo la concentrazione dei portatori intrinseci a due temperature si può quindi ricavare il valore dell'energia di gap:

$$\frac{n_i(900K)}{n_i(800K)} = \left(\frac{900K}{800K} \right)^{3/2} \exp \left[-\frac{E_G}{2K_B} \left(\frac{1}{900K} - \frac{1}{800K} \right) \right].$$

Invertendo si ha

$$E_G = -\frac{2K_B}{\frac{1}{800K} - \frac{1}{900K}} \ln \left[\frac{n_i(800K)}{n_i(900K)} \left(\frac{900K}{800K} \right)^{3/2} \right] = 1 \text{ eV}.$$

La stessa cosa la possiamo fare con la successiva coppia di temperature:

$$E_G = -\frac{2K_B}{\frac{1}{700K} - \frac{1}{800K}} \ln \left[\frac{n_i(700K)}{n_i(800K)} \left(\frac{800K}{700K} \right)^{3/2} \right] = 1 \text{ eV}.$$

Abbiamo verificato la nostra ipotesi, infatti in questa regione di temperature tra 900K e 700K la gap è costante, pertanto siamo giustificati a considerare questo regime intrinseco, la gap vale quindi 1 eV.

2. Nell'intervallo di temperature tra 700K e 600K, utilizzando lo stesso ragionamento di prima troviamo:

$$E_G = -\frac{2K_B}{\frac{1}{600K} - \frac{1}{700K}} \ln \left[\frac{n_i(600K)}{n_i(700K)} \left(\frac{700K}{600K} \right)^{3/2} \right] = 0.984 \text{ eV}.$$

La gap non risulta essere la stessa di prima, stiamo dunque entrando in un altro regime e possiamo quindi pensare che a questa temperatura la concentrazione dei donatori influenza quella totale dei portatori. Cerchiamo di determinare la concentrazione dei donatori, utilizzando la legge d'azione di massa e l'equazione di neutralità di carica, in cui assumiamo che tutti gli atomi donori sono ionizzati ($N_d^+ = N_d$), cosa che verificheremo alla fine:

$$\begin{aligned} n(T)p(T) &= n_i^2(T) \\ n(T) &= p(T) + N_d^+. \end{aligned}$$

Dalla combinazione di queste ricaviamo:

$$N_d = n(T) - \frac{n_i^2(T)}{n(T)} = 1 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$$

dove $n(T)$ é il dato dell'esercizio, mentre la densità di portatori intrinseci a 600K può essere calcolata usando il valore a 900K e l'energia della gap calcolata prima:

$$n_i(600K) = n_i(900K) \left(\frac{600}{900} \right)^{3/2} e^{-\frac{E_g}{2K_B} \left(\frac{1}{600} - \frac{1}{900} \right)} = 2.36 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}.$$

Notiamo che la densità di portatori intrinseci é leggermente minore della densità di portatori totali, e un ordine di grandezza superiore di N_d , quindi 600 K sarà vicino al confine tra regime intrinseco e di saturazione.

3. Anche a $T=500K$ la densità di portatori intrinseci può essere calcolata con una operazione di estrapolazione dal regime a alte temperature:

$$n_i(500K) = n_i(900K) \left(\frac{500}{900} \right)^{3/2} e^{-\frac{E_g}{2K_B} \left(\frac{1}{500} - \frac{1}{900} \right)} = 2.6 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3},$$

In questo caso la densità di portatori intrinseci é di nuovo minore della densità di portatori totali a questa temperatura (dato dell'esercizio), mentre risulta essere confrontabile con N_d , pertanto a 500 K il semiconduttore si trova nel dentro al regime di saturazione.