

Fisica della Materia Condensata.  
Prof. Paola Gallo.  
Prova del III appello di esame 12 Giugno 2024

## 1 Esercizio 1

Un solido monoatomico che cristallizza in una struttura cubica a facce centrate con lato del cubo  $a = 2.3 \text{ \AA}$  viene irraggiato da un fascio di raggi X monocromatici di lunghezza d'onda  $\lambda = 1.25 \text{ \AA}$ .

1. Determinare l'angolo al quale si osservano i primi quattro picchi di Bragg. (2.5 punti)
2. Determinare la velocità del suono se la temperatura di Debye del solido vale  $T_D = 270 \text{ K}$ . (2.5 punti)
3. Determinare il valore del calore specifico a  $T = 15 \text{ K}$ . (2.5 punti)
4. Determinare il valore del calore specifico a  $T = 1500 \text{ K}$  nel caso di cristallo monoatomico e biatomico? (2.5 punto)

## 2 Esercizio 2

Sia data una catena monoatomica lineare disposta lungo l'asse  $\hat{x}$  di passo reticolare  $a = 2 \text{ \AA}$ . Su ogni nodo è disposto un atomo bivalente.

1. Scrivere la forma esplicita delle bande  $E_s(\vec{k})$  e  $E_{p_x}(\vec{k})$  in approssimazione a tight binding per interazione a primi vicini da funzioni di tipo  $s$  e  $p_x$ . Siano  $E_{0,s} = 1.2 \text{ eV}$ ,  $E_{0,p_x} = 4.5 \text{ eV}$ ,  $|\gamma_s| = 0.2 \text{ eV}$ ,  $|\gamma_{p_x}| = 0.3 \text{ eV}$ . Si trascurino tutti gli altri integrali di sovrapposizione. (4 punti)
2. Disegnare le bande di energia, determinare quanto vale l'energia di gap a bordo e centro zona e l'energia di Fermi. Specificare se il materiale si comporta da isolante o da conduttore. (3 punti)
3. Scrivere l'espressione della banda derivante da orbitali  $s$  nell'approssimazione a secondi vicini. L'integrale di sovrapposizione tra secondi vicini vale  $\gamma_{s,2} = 0.15 \text{ eV}$ . (3 punti)

### 3 Esercizio 3

Si consideri un semiconduttore drogato con atomi accettori in concentrazione  $N_A = 4.5 \cdot 10^{19} \text{ m}^{-3}$ . L'energia della gap vale  $\epsilon_g = 1 \text{ eV}$ . Le masse efficaci di elettroni e lacune siano considerate uguali tra loro ed indipendenti dalla temperatura. Siano noti il tempo medio di scattering delle lacune  $\tau_h = 1 \cdot 10^{-12} \text{ s}$ , la loro mobilità  $\mu_h = 0.7 \text{ m}^2/\text{Vs}$  e la costante di Hall  $R_H = 22 \text{ m}^3/\text{C}$  a  $T = 20 \text{ K}$ .

1. Calcolare il valore dell'energia di legame  $\epsilon_a$ . (4 punti)
2. Determinare la conducibilità a  $T = 20 \text{ K}$ . (3 punti)
3. Determinare in che regime si trova il semiconduttore e quale sia la sua conducibilità elettrica a  $T = 500 \text{ K}$  sapendo che a questa temperatura  $\tau_e = 2.3 \cdot \tau_h = 0.7 \cdot 10^{-13} \text{ s}$ . (3 punti)

$1 \text{ u.m.a.} = 1.66 \cdot 10^{-27} \text{ Kg}$ ,  $e = 1.6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$ ,  $m_e = 9.1 \cdot 10^{-31} \text{ Kg}$ ,  $K_B = 1.38 \cdot 10^{-23} \text{ J/K} = 8.62 \cdot 10^{-5} \text{ eV/K}$ ,  $\hbar = 1.054 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s} = 6.58 \cdot 10^{-16} \text{ eV} \cdot \text{s}$

## 4 Soluzioni

### 4.1 Esercizio 1

1. Il reticolo *fcc* ha reticolo reciproco di simmetria *bcc*. Dato che per un tale cristallo tutti i picchi di diffrazione sono visibili, i primi quattro picchi di diffrazione sono associati ai primi quattro vettori del reticolo reciproco più piccoli, che sono in modulo

$$G_1 = \sqrt{3} \frac{2\pi}{a}, G_2 = \frac{4\pi}{a}, G_3 = \sqrt{2} \frac{4\pi}{a}, G_4 = \sqrt{11} \frac{2\pi}{a}.$$

La legge di Bragg mette in relazione il modulo di questi vettori con il modulo del vettore  $\vec{k}$  scambiato dalla sonda:

$$G = 2k \sin(\theta/2) = \frac{4\pi}{\lambda} \sin(\theta/2)$$

da cui si ricava

$$\theta_1 = 27, \theta_2 = 40, \theta_3 = 53, \theta_4 = 83.$$

2. La velocità del suono, supponendo che le tre branche siano degeneri, si può ricavare dalla relazione

$$K_B T_D = \hbar v_s k_D$$

dove il vettore d'onda di Debye si può ricavare, in tre dimensioni, da

$$k_D = \sqrt[3]{6\pi^2 n} = \frac{\sqrt[3]{24\pi^2}}{a} = \frac{2\sqrt[3]{3\pi^2}}{a} = 2.6 \cdot 10^{10} \text{ m}^{-1}$$

avendo usato il fatto che per un reticolo *fcc* vale  $n = \frac{4}{a^3}$ .  
Si ha quindi che

$$v_s = \frac{K_B T_D}{\hbar k_D} = 1300 \text{ m/s}.$$

3. A  $T = 15K \ll T_D$  ci si trova in regime di basse temperature e si può sfruttare quindi la relazione

$$c_V(T) = \frac{C_V(T)}{V} = \frac{12}{5} \pi^4 \frac{4}{a^3} K_B \left( \frac{T}{T_D} \right)^3$$

ottenendo

$$c_V(15K) = 1.8 \cdot 10^5 \text{ J/Km}^3.$$

4. A  $T = 1550K \gg T_D$  ci si trova in regime di alte temperature, per cui si utilizza l'approssimazione di Dulong-Petit per i  $3N$  modi acustici

$$c_V(T) = 3n K_B$$

e quindi per un cristallo monoatomico si trova

$$c_V(1500K) = 2 \cdot 10^7 \text{ J/Km}^3.$$

Nel caso in cui il cristallo fosse biatomico si avrebbero anche i modi ottici che contribuiscono al calore specifico con un fattore  $3N$ . Di conseguenza

$$c_V(T) = 3n K_B + 3n K_B$$

e quindi

$$c_V(1500K) = 1 \cdot 10^8 \text{ J/Km}^3.$$

## 4.2 Esercizio 2

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

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

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 mentre quella tra orbitali  $p_x$  è negativa, di conseguenza  $\gamma_s > 0$  e  $\gamma_{p_x} < 0$ . Alla fine le bande di energia avranno la forma

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

2. Dal disegno delle bande di energia risulta evidente come il minimo della banda  $s$  sia a centro zona e il massimo a bordo zona, mentre per la banda  $p_x$  si ha il massimo a centro zona e il minimo a bordo zona. In particolare a centro zona ( $k = 0$ ) si hanno i  $E_s^{MIN} = 0.8 \text{ eV}$  e  $E_{p_x}^{MAX} = 5.1 \text{ eV}$ , mentre a bordo zona ( $k = \pm\pi/a$ ) si hanno  $E_s^{MAX} = 1.6 \text{ eV}$  e  $E_{p_x}^{MIN} = 3.9 \text{ eV}$ . A centro zona la distanza tra le due bande risulta essere  $E_{p_x}^{MAX} - E_s^{MIN} = 4.3 \text{ eV}$ , mentre a bordo zona  $E_{p_x}^{MIN} - E_s^{MAX} = 2.3 \text{ eV}$ .

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

$$E_F = E_s\left(\frac{\pi}{a}\right) = 1.6 \text{ eV}.$$

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

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

### 4.3 Esercizio 3

1. A 20 K vale la relazione

$$p(T) = \sqrt{\frac{N_V(T) N_A}{2}} \exp\left(-\frac{\epsilon_a}{2 K_B T}\right) \quad (1)$$

con

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

Invertendo la relazione (1) si trova l'energia di legame degli accettori

$$\epsilon_a = -2 K_B T \ln \left( p(T) \sqrt{\frac{2}{N_V(T) N_A}} \right).$$

Per ricavare la massa  $m_V^*$  usiamo la mobilità a 20 K:

$$m_V^* = \frac{q \tau_h}{\mu_h} = 2 \cdot 10^{-31} \text{ Kg}$$

e inserendo nella (2) otteniamo  $N_V(20\text{K}) = 5 \cdot 10^{22} \text{ m}^{-3}$ . Infine si ricava

$$\epsilon_a = -2 K_B(20 \text{ K}) \ln \left( p(20 \text{ K}) \sqrt{\frac{2}{N_V(20 \text{ K}) N_A}} \right) = 2 \cdot 10^{-2} \text{ eV}.$$

2. A 20 K si ha:

$$p(20 \text{ K}) = \frac{1}{q R_H(20 \text{ K})} = 2.71 \cdot 10^{17} \text{ m}^{-3}.$$

e la conducibilità risulta quindi essere

$$\sigma(20 \text{ K}) = q p \mu_h = \frac{\mu_h}{R_H(20 \text{ K})} = 3 \cdot 10^{-2} \text{ m}^{-1} \Omega^{-1}$$

3. Per capire in quale regime siamo a 500 K, controlliamo la densità di portatori intrinseci, dal momento che le masse sono uguali ed indipendenti dalla temperature si ha che

$$p_i(T) = N_V(T) \exp\left(-\frac{\epsilon_g}{2 K_B T}\right).$$

e quindi, dato

$$\frac{N_V(T_1)}{N_V(T_2)} = \left(\frac{T_1}{T_2}\right)^{3/2},$$

ponendo  $T_1 = 500 \text{ K}$  e  $T_2 = 20 \text{ K}$  otteniamo

$$p_i = 2 \cdot 10^{24} \text{ m}^{-3}.$$

Dato che  $p_i \gg N_A$ , a  $500 \text{ K}$  siamo in regime intrinseco, di conseguenza la conducibilità risulta

$$\sigma(500 \text{ K}) = q p_i (\mu_h + \mu_e) = \frac{q^2}{m^*} p_i (\tau_h + \tau_e) = 70 \text{ m}^{-1} \Omega^{-1}$$

avendo usato il valore della massa a  $20 \text{ K}$ .