

Fisica della Materia Condensata

Prof. Paola Gallo

Esame - 10 Febbraio 2026

1 Esercizio 1

Si abbia un campione con reticolo rettangolare di parametri reticolari a e b ($b < a$). La frazione di impacchettamento del reticolo è pari a 0,65.

1. Calcolare i moduli dei primi quattro vettori di reticolo reciproco $\vec{G}_i$ e ordinarli in ordine crescente.
2. Il cristallo viene studiato con il metodo delle polveri ($\lambda = 0,154 \text{ nm}$) e il primo picco si osserva ad un angolo $\theta = 35^\circ$. Quanto valgono i parametri reticolari a e b ?
3. Calcolare gli angoli a cui si osservano i successivi due picchi di diffrazione.

2 Esercizio 2

Un solido isotropo di densità $\rho = 6,0 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$ cristallizza in un reticolo cubico semplice di lato a . La base è monoatomica ed è costituita da un atomo di massa M . Le bande di dispersione sono

$$\begin{aligned}\omega_T(k) &= \omega_T^0 \sin\left(\frac{ka}{2}\right) \\ \omega_L(k) &= \omega_L^0 \sin\left(\frac{ka}{2}\right)\end{aligned}$$

con $\omega_T^0 = 4,0 \times 10^{12} \text{ rad/s}$, costante elastica per la componente trasversa $C_T = 4,8 \times 10^{-2} \text{ N/m}$ e tale che $C_T/C_L = 0,1$.

1. Calcolare il valore di a .
2. Calcolare le temperature di Debye.
3. Calcolare la capacità termica del solido per unità di volume a $T_1 = 8 \text{ K}$ e a $T_2 = 500 \text{ K}$.

3 Esercizio 3

Sia data una catena monoatomica lineare disposta lungo l'asse x di passo reticolare $a = 0,3 \text{ nm}$. Su ogni nodo è disposto un atomo trivalente.

1. Scrivere la legge di dispersione delle bande $\epsilon_s(k)$ e $\epsilon_{p_x}(k)$ risultanti dall'approssimazione a tight binding a primi vicini, esplicitandone i valori numerici. Si trascurino le interazioni miste $s - p_x$. Siano dati i seguenti parametri energetici:
 - Banda s : $\epsilon_{0,s} = 2,0 \text{ eV}$, $|\gamma_s| = 0,2 \text{ eV}$.
 - Banda p_x : $\epsilon_{0,p} = 4,0 \text{ eV}$, $|\gamma_p| = 0,4 \text{ eV}$.
2. Disegnare le bande di energia. Quanto vale la differenza di energia tra le bande a centro zona (Γ) e a bordo zona?
3. Il materiale si comporta come isolante o come conduttore?
4. Calcolare la massa efficace degli elettroni al fondo della banda di conduzione.

4 Esercizio 4

Si consideri un semiconduttore drogato n alla temperatura di 10 K. La densità degli atomi donori è $N_D = 2,0 \times 10^{18} \text{ m}^{-3}$. La massa degli elettroni di conduzione è $m_c^* = 0,25m_e$ e l'energia di ionizzazione degli atomi donori è $\epsilon_d = 45 \text{ meV}$.

1. Calcolare la densità di elettroni nella banda di conduzione.
2. Il semiconduttore è degenere o non degenere?
3. Sapendo che in regime intrinseco le densità dei portatori sono $n_i(250 \text{ K}) = 3,0 \times 10^{19} \text{ m}^{-3}$ e $n_i(350 \text{ K}) = 5,0 \times 10^{21} \text{ m}^{-3}$, trovare il valore della gap del semiconduttore.

Costanti utili (SI):

$$1 \text{ u.m.a.} = 1,66 \times 10^{-27} \text{ kg}$$

$$e = 1,602 \times 10^{-19} \text{ C},$$

$$m_e = 9,11 \times 10^{-31} \text{ kg},$$

$$k_B = 1,38 \times 10^{-23} \text{ J/K} = 8,617 \times 10^{-5} \text{ eV/K},$$

$$\hbar = 1,054 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s} = 6,582 \times 10^{-16} \text{ eV} \cdot \text{s},$$

$$1 \text{ eV} = 1,602 \times 10^{-19} \text{ J} = 11\,600 \text{ K}.$$

5 Soluzioni

5.1 Esercizio 1

1. I vettori di base del reticolo diretto sono:

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

I vettori di base del reticolo reciproco sono:

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

I primi due vettori di reticolo reciproco in ordine crescente sono:

$$\begin{aligned} \vec{G}_1 = \vec{g}_1 &= \frac{2\pi}{a}\hat{x}, \\ \vec{G}_2 = \vec{g}_2 &= \frac{2\pi}{b}\hat{y} = \frac{a}{b} \frac{2\pi}{a}\hat{y}, \end{aligned}$$

i cui moduli sono

$$\begin{aligned} G_1 = |\vec{G}_1| &= |\vec{g}_1| = \frac{2\pi}{a}, \\ G_2 = |\vec{G}_2| &= |\vec{g}_2| = \frac{a}{b} G_1. \end{aligned}$$

Altri due vettori sono $\vec{G} = \vec{g}_1 + \vec{g}_2$ e $\vec{G} = 2\vec{g}_1$. Per determinare l'ordine, si trova a/b . Sfruttando l'informazione sul fattore di impacchettamento e considerando che $R_{max} = b/2$:

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

da cui

$$\frac{a}{b} = \frac{\pi}{4} \frac{1}{0.65} = 1,21.$$

Dunque i vettori ordinati sono:

$$\begin{aligned} G_1 &= \frac{2\pi}{a} \\ G_2 &= 1,21 G_1 \\ G_3 &= |g_1 + g_2| = \sqrt{1 + (a/b)^2} G_1 = 1,57 G_1 \\ G_4 &= 2 G_1. \end{aligned}$$

2. Invertendo la formula per la condizione di interferenza costruttiva per il primo picco (associato a G_1):

$$|\vec{G}_1| = \frac{2\pi}{a} = \frac{4\pi}{\lambda} \sin\left(\frac{\theta^{(1)}}{2}\right)$$

si ottiene

$$a = \frac{\lambda}{2 \sin\left(\frac{\theta^{(1)}}{2}\right)} = \frac{0,154 \text{ nm}}{2 \sin(17,5^\circ)} = \boxed{0,256 \text{ nm}}$$

e

$$b = \frac{a}{1,21} = \boxed{0,211 \text{ nm}}.$$

3. Per calcolare i valori degli angoli ai quali si osservano i successivi picchi:

$$\theta^{(2)} = 2 \arcsin \left(\frac{\lambda G_2}{4 \pi} \right) = 2 \arcsin \left(\frac{\lambda 1.21 (2\pi/a)}{4 \pi} \right) = \boxed{42,6^\circ}$$

$$\theta^{(3)} = 2 \arcsin \left(\frac{\lambda G_3}{4 \pi} \right) = 2 \arcsin \left(\frac{\lambda 1.57 (2\pi/a)}{4 \pi} \right) = \boxed{56,4^\circ}$$

5.2 Esercizio 2

1. a si ricava invertendo la formula per la densità: $\rho = M/a^3$. La massa M si ricava da $\omega_T^0 = \sqrt{4 C_T/M}$:

$$M = \frac{4 C_T}{(\omega_T^0)^2} = \frac{4 \cdot 0,048 \text{ N/m}}{(4,0 \times 10^{12} \text{ /s})^2} = 1,20 \times 10^{-26} \text{ kg}.$$

Risulta quindi

$$a = \left(\frac{M}{\rho} \right)^{1/3} = \left(\frac{1,2 \times 10^{-26} \text{ kg}}{6,0 \times 10^3 \text{ kg/m}^3} \right)^{1/3} = \boxed{1,26 \times 10^{-10} \text{ m}}.$$

2. **Temperature di Debye.**

La temperatura di Debye è data da

$$\theta_D = \frac{\hbar \omega_D}{k_B}$$

con

$$\omega_D = \frac{v_s}{a} \sqrt[3]{6 \pi^2}.$$

Calcoliamo le velocità del suono

$$v_s = \lim_{k \rightarrow 0} \frac{d\omega}{dk}$$

In particolare, la velocità del suono trasversale è

$$v_s^T = \frac{a \omega_T^0}{2}.$$

La temperatura di Debye trasversale è allora

$$\theta_D^T = \frac{\hbar}{k_B} \omega_T^0 \frac{\sqrt[3]{6 \pi^2}}{2} = \frac{1,05 \times 10^{-34}}{1,38 \times 10^{-23}} \cdot \frac{4,0 \times 10^{12}}{2} \cdot 3,898 = \boxed{59,6 \text{ K}}$$

Per la longitudinale, usando la relazione $\omega_L^0 = \sqrt{10} \omega_T^0$:

$$\theta_D^L = \sqrt{10} \theta_D^T = 3,16 \cdot 59,6 \text{ K} = \boxed{188 \text{ K}}$$

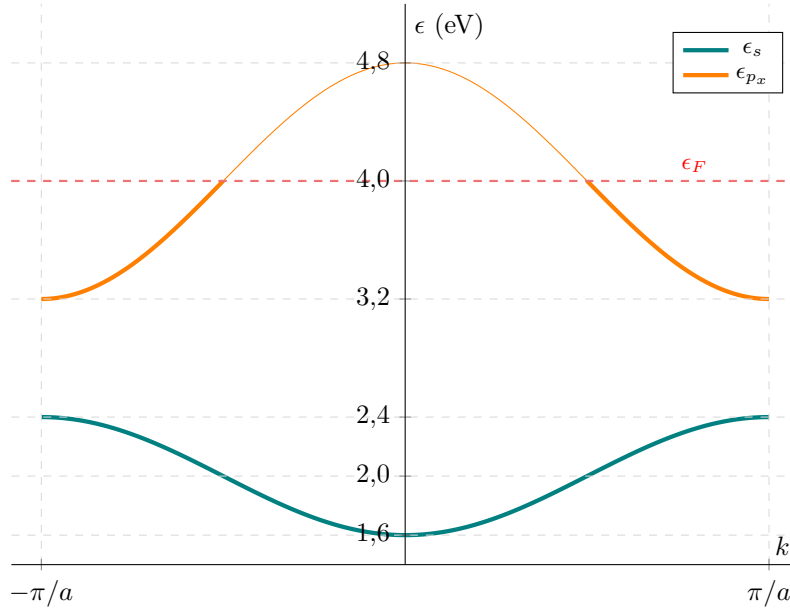
3. **Capacità termica a $T = 8 \text{ K}$.** A bassa temperatura

$$\begin{aligned} \frac{c_V}{V} &= \frac{4}{5} \pi^4 k_B \frac{1}{a^3} \left[\left(\frac{T}{\theta_D^L} \right)^3 + 2 \left(\frac{T}{\theta_D^T} \right)^3 \right] \\ &= \frac{4}{5} \pi^4 \cdot 1,38 \times 10^{-23} \frac{\text{J}}{\text{K}} \cdot \frac{1}{(1,26 \times 10^{-10} \text{ m})^3} \cdot \left[\left(\frac{8}{188} \right)^3 + 2 \left(\frac{8}{59,6} \right)^3 \right] \\ &= \boxed{2,65 \times 10^6 \frac{\text{J}}{\text{Km}^3}} \end{aligned}$$

A $T = 500 \text{ K}$ (Regime Dulong-Petit):

$$\frac{c_V}{V} = \frac{3k_B}{a^3} = 3 \cdot 1,38 \times 10^{-23} \frac{\text{J}}{\text{K}} \cdot \frac{1}{(1,26 \times 10^{-10} \text{ m})^3} = \boxed{2,07 \times 10^7 \frac{\text{J}}{\text{Km}^3}}$$

5.3 Esercizio 3



1. Espressione delle bande

- **Banda s :** Data la simmetria sferica dell'orbitale s , l'interazione è concorde e $\gamma_s > 0$.

$$\epsilon_s(k) = \epsilon_{0,s} - 2|\gamma_s| \cos(ka) = \boxed{2,0 - 0,4 \cos(ka) \text{ [eV]}}$$

- **Banda p_x :** L'orbitale p_x è orientato lungo la catena. I lobi adiacenti hanno segno discorde: $\gamma_p < 0$.

$$\epsilon_{p_x}(k) = \epsilon_{0,p} + 2|\gamma_p| \cos(ka) = \boxed{4,0 + 0,8 \cos(ka) \text{ [eV]}}$$

2. Valori estremi

Calcoliamo i massimi e minimi nella prima zona di Brillouin:

- **Banda s :** Minimo a $k = 0$: $\epsilon_s = 2,0 - 0,4 = \mathbf{1,6 \text{ eV}}$.
Massimo a $k = \pi/a$: $\epsilon_s = 2,0 + 0,4 = \mathbf{2,4 \text{ eV}}$.
- **Banda p_x :** Massimo a $k = 0$: $\epsilon_p = 4,0 + 0,8 = \mathbf{4,8 \text{ eV}}$.
Minimo a $k = \pi/a$: $\epsilon_p = 4,0 - 0,8 = \mathbf{3,2 \text{ eV}}$.

Dunque

$$\boxed{\Delta\epsilon(0) = 3,2 \text{ eV}}$$

$$\boxed{\Delta\epsilon\left(\frac{\pi}{a}\right) = 0,8 \text{ eV}}$$

3. Stato metallico

Gli atomi sono trivalenti (3 elettroni per cella).

- La banda s viene riempita completamente con $2N$ elettroni.
- I restanti N elettroni occupano la banda p_x . Essendo la capacità totale della banda pari a $2N$, la banda p_x risulta **riempita a metà**, a partire dal fondo. Gli elettroni quindi occupano la banda p_x fino al valore 4,0 eV (si veda la figura in alto). Dunque, $\epsilon_F = 4,0 \text{ eV}$ è il valore dell'energia di Fermi in approssimazione tight binding.

Poiché l'ultima banda è parzialmente piena, il materiale è un **conduttore** e la banda p_x è la banda di conduzione.

4. Massa Efficace

Il fondo della banda di conduzione (p_x) si trova al bordo zona ($k = \pm\pi/a$). La massa efficace è data da:

$$m^* = \hbar^2 \left(\frac{d^2\epsilon}{dk^2} \right)^{-1}$$

Calcolando la derivata seconda di $\epsilon_{p_x}(k)$ a $k = \pm\pi/a$:

$$\frac{d^2\epsilon_{p_x}}{dk^2} = -2a^2|\gamma_p|\cos(ka) \xrightarrow{k=\pm\pi/a} +2a^2|\gamma_p|$$

Quindi:

$$m^* = \frac{\hbar^2}{2a^2|\gamma_p|} = \frac{1,054^2 \times 10^{-68} \text{ J}^2 \text{ s}^2}{2 \cdot 0,4 \times 1,602 \times 10^{-19} \text{ J} \cdot 9,0 \times 10^{-20} \text{ m}^2} \approx 9,63 \times 10^{-31} \text{ kg} \approx \boxed{1,05 m_e}$$

5.4 Esercizio 4

1. Nel regime a basse temperature possiamo calcolare la densità di elettroni:

$$n \approx \sqrt{\frac{N_D N_C}{2}} e^{-\frac{\epsilon_d}{2k_B T}}$$

$$N_C(T) = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_c^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} (k_B T)^{3/2} \approx 1,9 \times 10^{22} \text{ m}^{-3}.$$

Pertanto

$$n \approx \sqrt{\frac{2,0 \times 10^{18} \cdot 1,9 \times 10^{22}}{2}} \exp\left(-\frac{0,045 \times 11600}{2 \cdot 10}\right) \approx 6,4 \times 10^8 \text{ m}^{-3}.$$

2. Condizione di non degenerazione: $\epsilon_C - \mu \gg k_B T$. Consideriamo:

$$n = N_C e^{-\beta(\epsilon - \mu)} \implies \log\left(\frac{n}{N_C}\right) = -\beta(\epsilon - \mu)$$

$$\beta(\epsilon - \mu) = \log\left(\frac{N_C}{n}\right) \approx \log\left(\frac{10^{22}}{10^9}\right) \approx 30 \gg 1.$$

Il semiconduttore è **non degenerare**.

3. Legge di azione di massa intrinseca $n_i(T) \propto T^{3/2} e^{-\beta\epsilon_g/2}$. Usando il rapporto tra le densità a $T_1 = 250 \text{ K}$ e $T_2 = 350 \text{ K}$:

$$\frac{n_i(350 \text{ K})}{n_i(250 \text{ K})} = \left(\frac{350 \text{ K}}{250 \text{ K}} \right)^{3/2} \exp\left[-\frac{\epsilon_g}{2k_B} \left(\frac{1}{350 \text{ K}} - \frac{1}{250 \text{ K}} \right)\right].$$

$$\epsilon_g = \frac{2k_B \log\left[\frac{n_i(350)}{n_i(250)} \left(\frac{250}{350}\right)^{3/2}\right]}{\left(\frac{1}{250 \text{ K}} - \frac{1}{350 \text{ K}}\right)} = \frac{2}{11600} \frac{\log\left[\frac{n_i(350)}{n_i(250)} \left(\frac{250}{350}\right)^{3/2}\right]}{\left(\frac{1}{250} - \frac{1}{350}\right)} = \boxed{0,69 \text{ eV}}.$$