

Fisica della Materia Condensata

Prof. Paola Gallo

Esame - 22 Gennaio 2026

Chi ha superato il primo esonero svolga gli esercizi 3 e 4 in un tempo massimo di due ore (il punteggio sarà riportato in trentesimi). Chi non ha superato il primo esonero svolga tutti e quattro gli esercizi in un tempo massimo di quattro ore oppure gli esercizi 1 e 2 e/o 3 e 4, ciascuna coppia in due ore.

1 Esercizio 1

Un cristallo AB cristallizza in una struttura cubica. I due atomi sono individuati dai vettori di base $\vec{d}_A = \vec{0}$ e $\vec{d}_B = \frac{a}{4} (1 \ 1 \ 1)$. Sia f_A il fattore di forma dell'atomo A e f_B il fattore di forma dell'atomo B, e sia $f_B > f_A$.

1. Studiare l'andamento del fattore di struttura del cristallo al variare degli indici di Miller. In che rapporto sono i fattori di forma f_A e f_B se il rapporto tra le intensità dei primi due picchi visibili è $I_1/I_2 = 5$?
2. Il cristallo viene studiato con il metodo delle polveri ($\lambda = 0,150$ nm) e il terzo picco si osserva ad un angolo $\theta = 50^\circ$. Quanto vale il lato della cella cubica a ?
3. Calcolare il fattore di impacchettamento nell'ipotesi in cui il raggio dell'atomo B sia il doppio di quello dell'atomo A.

2 Esercizio 2

Un solido anisotropo monoatomico ha reticolo *bcc* con lato della cella cubica $a = 0,310$ nm. La relazione di dispersione del modo acustico longitudinale è

$$\omega_L(k) = \omega_0 \sin\left(\frac{a}{2}k\right)$$

mentre quella dei modi acustici trasversali degeneri è

$$\omega_T(k) = \omega_0 \left[\sin\left(\frac{a}{2}k\right) + \sin(ak) \right].$$

Sia $\omega_0 = 2,00 \times 10^{13}$ rad/s.

Si utilizzi il sistema internazionale.

1. Trovare le velocità del suono nel solido.
2. Calcolare le temperature di Debye.
3. Calcolare la capacità termica del solido per unità di volume a $T_1 = 15$ K e a $T_2 = 2500$ K, specificando quali modi contribuiscono a questa temperatura.

3 Esercizio 3

Si abbia un cristallo bidimensionale quadrato disposto lungo il piano xy . Il passo reticolare è $a = 2,0 \text{ \AA}$. Su ogni sito reticolare è posto un atomo bivalente con orbitali p_z e d_{xy} . Gli integrali di trasferimento γ e gli elementi di matrice diagonale $E - \beta$ (stesso orbitale e stesso sito) dell'Hamiltoniana sono dati da:

$$|\gamma_p| = 0,4 \text{ eV} \quad |\gamma_d| = 0,8 \text{ eV} \quad E_p - \beta_p = 2,0 \text{ eV} \quad E_d - \beta_d = 7,5 \text{ eV}$$

1. Scrivere la forma esplicita delle bande $E_p(\vec{q})$ e $E_d(\vec{q})$ in approssimazione di tight binding con interazione a primi vicini.
2. Il cristallo si comporta come conduttore o come isolante?
3. Calcolare la massa efficace degli elettroni di conduzione a centro zona.

4 Esercizio 4

In un semiconduttore a 300 K il rapporto tra le mobilità degli elettroni e delle lacune vale $\mu_p/\mu_n = 25$, l'energia di gap è $E_G = 1,0 \text{ eV}$, il coefficiente di Hall è nullo, le densità degli stati in banda di conduzione e valenza sono rispettivamente $N_C = 4,0 \times 10^{24} \text{ m}^{-3}$ e $N_V = 2,0 \times 10^{23} \text{ m}^{-3}$

1. Il semiconduttore è intrinseco o drogato?
2. Calcolare la concentrazione di elettroni e lacune (in caso di drogaggio considerare tutte le impurezze ionizzate)
3. Calcolare il rapporto tra la conducibilità intrinseca e quella estrinseca $\sigma_{estr}/\sigma_{int}$ del semiconduttore.

$$1 \text{ u.m.a.} = 1,66 \times 10^{-27} \text{ kg}, \quad e = 1,6 \times 10^{-19} \text{ C}, \quad m_e = 9,1 \times 10^{-31} \text{ kg}, \quad k_B = 1,38 \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1} = 8,62 \times 10^{-5} \text{ eV K}^{-1}, \quad \hbar = 1,054 \times 10^{-34} \text{ J s} = 6,58 \times 10^{-16} \text{ eV s}, \quad 1 \text{ eV} = 11\,605 \text{ K} = 1,602 \times 10^{-19} \text{ J}.$$

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

$$\begin{cases} \vec{d}_0 = \vec{d}_A = (0, 0, 0) \\ \vec{d}_1 = \vec{d}_B = \frac{a}{4}(1, 1, 1). \end{cases}$$

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.

$$\begin{aligned} \vec{G} \cdot \vec{d}_0 &= 0, \\ \vec{G} \cdot \vec{d}_1 &= \frac{2\pi}{a}(h, k, l) \cdot \frac{a}{4}(1, 1, 1) = \frac{\pi}{2}(h + k + l). \end{aligned}$$

Quindi

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

In funzione di $(h + k + l) \bmod 4$:

$(h + k + l) \bmod 4$	$e^{-i\frac{\pi}{2}(h+k+l)}$	F
0	1	$N(f_A + f_B)$
1	$-i$	$N(f_A - i f_B)$
2	-1	$N(f_A - f_B)$
3	i	$N(f_A + i f_B)$

Dato che $f_B > f_A$, il fattore di struttura non si annulla mai, di conseguenza tutte le diffrazioni sono permesse e daranno luogo ad un picco visibile.

I primi vettori del reticolo reciproco in ordine di lunghezza crescente sono:

$$\begin{aligned} \vec{G}_{100} \quad \left| \vec{G}_{100} \right| &= \frac{2\pi}{a}, \quad h + k + l = 1 \\ \vec{G}_{110} \quad \left| \vec{G}_{110} \right| &= \frac{2\pi}{a} \sqrt{2}, \quad h + k + l = 2 \\ \vec{G}_{111} \quad \left| \vec{G}_{111} \right| &= \frac{2\pi}{a} \sqrt{3}, \quad h + k + l = 3 \\ \vec{G}_{200} \quad \left| \vec{G}_{200} \right| &= \frac{2\pi}{a} \cdot 2, \quad h + k + l = 2 \end{aligned}$$

Si ha dunque

$$\frac{I_1}{I_2} \propto \frac{|F(\vec{G}_1)|^2}{|F(\vec{G}_2)|^2} = \frac{f_A^2 + f_B^2}{(f_A - f_B)^2} = \frac{f_A^2}{f_A^2} \frac{1 + \frac{f_B^2}{f_A^2}}{\left(1 - \frac{f_B}{f_A}\right)^2} = 5$$

che, per $\varphi = f_B/f_A > 1$, conduce a

$$1 + \varphi^2 = 5(1 - 2\varphi + \varphi^2) \implies 4\varphi^2 - 10\varphi + 4 = 0 \implies 2\varphi^2 - 5\varphi + 2 = 0$$

con soluzioni $\varphi = 2$ o $\varphi = 1/2$. Dato che deve essere $\varphi > 1$, la prima soluzione è l'unica accettabile. Per cui $\boxed{f_B = 2f_A}$.

2. Al terzo picco è associato il vettore \vec{G}_{111} . Si ha dunque

$$\vec{G}_{111} = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \end{pmatrix},$$

il cui modulo vale

$$|\vec{G}_{111}| = \frac{2\pi}{a} \sqrt{3}.$$

e pertanto

$$|\vec{G}_{111}| = \frac{4\pi}{\lambda} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)$$

si ottiene

$$a = \frac{\lambda\sqrt{3}}{2 \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)} = \frac{0,15 \text{ nm} \cdot \sqrt{3}}{2 \cdot \sin(25^\circ)} = \boxed{3,07 \text{ \AA}}.$$

3. Per calcolare il fattore di impacchettamento si deve tener conto del volume occupato dagli atomi nell'approssimazione in cui abbiano forma sferica e siano impenetrabili. L'atomo A si trova al vertice del cubo e ha raggio R , mentre l'atomo B, di raggio $2R$, si trova in posizione $\frac{a}{4} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$, cioè a distanza $a\sqrt{3}/4$ dal vertice lungo la diagonale principale.

Affinché gli atomi A e B siano tangenti:

$$R + 2R = \sqrt{3} \frac{a}{4} \implies R = \frac{a}{4\sqrt{3}}.$$

Il volume della cella cubica è $V_{cella} = a^3$. Il numero di atomi per cella è: 1 atomo B (interno alla cella) e $\frac{1}{8} \cdot 8 = 1$ atomo A (ai vertici). Il volume occupato è:

$$V_{occ} = \frac{4}{3}\pi (r_A^3 + r_B^3) = \frac{4}{3} [R^3 + (2R)^3] = 12\pi R^3 = \frac{a^3\pi}{16\sqrt{3}}.$$

Quindi

$$p.f. = \frac{V_{occ}}{V_{cella}} = \frac{a^3\pi}{16\sqrt{3}} \approx \boxed{0.113}.$$

5.2 Esercizio 2

1. Le velocità del suono si calcolano a partire dalle relazioni di dispersione

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

Per le diverse branche acustiche si avrà

$$v_L = \lim_{k \rightarrow 0} \frac{d\omega_L(k)}{dk} = \lim_{k \rightarrow 0} \left[\omega_0 \frac{a}{2} \cos\left(\frac{ka}{2}\right) \right] = \omega_0 \frac{a}{2} = 3,10 \times 10^3 \text{ m/s}$$

$$v_T = \lim_{k \rightarrow 0} \frac{d\omega_T(k)}{dk} = \lim_{k \rightarrow 0} \left[\omega_0 \left(\frac{a}{2} \cos\left(\frac{ka}{2}\right) + a \cos(ka) \right) \right] = \omega_0 \left(\frac{a}{2} + a \right) = 9,30 \times 10^3 \text{ m/s}.$$

2. La temperatura di Debye è data da

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

con $\omega_D = v_s k_D$ frequenza di Debye. In tre dimensioni e per un cristallo *bcc*, il vettore d'onda di Debye è

$$k_D = \sqrt[3]{6 \pi^2 n} = \sqrt[3]{6 \pi^2 \frac{2}{a^3}} = \frac{1}{a} \sqrt[3]{6 \pi^2 2} = 1,58 \times 10^{10} \text{ m}^{-1}.$$

Di conseguenza

$$\theta_D^L = \frac{\hbar}{k_B} \frac{v_s^L}{a} \sqrt[3]{12 \pi^2} = 374,0 \text{ K}$$

$$\theta_D^T = \frac{\hbar}{k_B} \frac{v_s^T}{a} \sqrt[3]{12 \pi^2} = 1122 \text{ K}$$

3. Dato che $T_1 < \theta_D^T, \theta_D^L$, ci troviamo in regime di basse temperature. La capacità termica per unità di volume sarà ($N/V = 2/a^3$)

$$\frac{C_V(T)}{V} = \frac{4}{5} \pi^4 n k_B \left[1 \cdot \left(\frac{T}{\theta_D^L} \right)^3 + 2 \cdot \left(\frac{T}{\theta_D^T} \right)^3 \right] \Big|_{T_1=15 \text{ K}} = 5,00 \times 10^3 \text{ J m}^{-3} \text{ K}^{-1}.$$

Ad alte temperature, $T_2 > \theta_D^T, \theta_D^L$, possiamo usare l'approssimazione di Dulong-Petit. Il contributo al calore specifico deriva dai $3N$ modi acustici. Si ha quindi

$$\frac{C_V}{V} = \frac{3Nk_B}{V} = \frac{3 \cdot 2k_B}{a^3} = 2,78 \times 10^6 \text{ J m}^{-3} \text{ K}^{-1}.$$

5.3 Esercizio 3

1. In un reticolo quadrato di passo a i primi vicini si trovano, rispetto ad un sito reticolare posto nell'origine, in $(\pm a, 0)$ e in $(0, \pm a)$. Dati i segni dei lobi, gli integrali di trasferimenti riguardanti gli orbitali p_z sono positivi (segni dei lobi a due a due concordi)

$$\gamma_{p_z, x} > 0 \quad \gamma_{p_z, y} > 0$$

mentre i segni degli integrali di trasferimento riguardanti gli orbitali d_{xy} sono negativi (segni a due a due discordi)

$$\gamma_{d_{xy}, x} < 0 \quad \gamma_{d_{xy}, y} < 0.$$

Data la simmetria del problema, $|\gamma_{p_z, x}| = |\gamma_{p_z, y}|$ e $|\gamma_{d_{xy}, x}| = |\gamma_{d_{xy}, y}|$.

La banda originata dagli orbitali p_z ha la forma

$$\begin{aligned} E_p(q) &= E_p - \beta_p - 2 |\gamma_{p_z, x}| \cos(q_x a) - 2 |\gamma_{p_z, y}| \cos(q_y a) \\ &= (2,0 - 0,8 [\cos(q_x a) + \cos(q_y a)]) \text{ eV}. \end{aligned}$$

mentre quella originata dagli orbitali d_{xy} ha la forma

$$\begin{aligned} E_d(q) &= E_d - \beta_d + 2 |\gamma_{d_{xy}, x}| \cos(q_x a) + 2 |\gamma_{d_{xy}, y}| \cos(q_y a) \\ &= (7,5 + 1,6 [\cos(q_x a) + \cos(q_y a)]) \text{ eV}. \end{aligned}$$

2. Per valutare la proprietà conduttiva del cristallo verifichiamo che non vi siano sovrapposizioni di banda. Per quanto riguarda la banda p_z , il valore minimo dell'energia si ha a centro zona

$$E_p^{min} = E_p(0, 0) = E_p - \beta_p - 2 |\gamma_{p_z, x}| - 2 |\gamma_{p_z, y}| = 0,4 \text{ eV},$$

ed il massimo ai vertici della prima zona di Brillouin

$$E_p^{max} = E_p(\pm \frac{\pi}{a}, \pm \frac{\pi}{a}) = E_p - \beta_p + 2 |\gamma_{p_z, x}| + 2 |\gamma_{p_z, y}| = 3,6 \text{ eV}.$$

Per la banda d_{xy} la situazione è opposta:

$$E_d^{min} = E_d(\pm \frac{\pi}{a}, \pm \frac{\pi}{a}) = E_d - \beta_d - 2 |\gamma_{d_{xy}, x}| - 2 |\gamma_{d_{xy}, y}| = 4,3 \text{ eV}$$

e

$$E_d^{max} = E_d(0, 0) = E_d - \beta_d + 2 |\gamma_{d_{xy}, x}| + 2 |\gamma_{d_{xy}, y}| = 10,7 \text{ eV}.$$

La banda p_z si trova sempre al di sotto della banda d_{xy} (le due bande non si toccano mai) ed essendo quella a più bassa energia, la p_z , piena perché gli atomi sono bivalenti, il cristallo si comporta come un isolante.

3. La massa efficace è definita come:

$$m^* = \hbar^2 \left(\frac{\partial^2 E(\vec{q})}{\partial q^2} \right)^{-1}.$$

Data la simmetria del problema

$$|\gamma_{d_{xy}, x}| = |\gamma_{d_{xy}, y}| = |\gamma_d|$$

e passo reticolare a identico, il tensore di massa efficace è diagonale e isotropo ($m_{d,xx}^* = m_{d,yy}^*$). Valutando a centro zona (Γ , dove $\vec{q} = 0$):

$$\begin{aligned} m_{d,xx}^* &= \frac{\hbar^2}{\frac{\partial^2 E_d}{\partial q_x^2}} \bigg|_{\vec{q}=0} = \frac{\hbar^2}{-2a^2 |\gamma_d| \cos(q_x a)} \bigg|_{q_x=0} \\ &= \frac{\hbar^2}{-2a^2 |\gamma_d|} = -1.1 \times 10^{-30} \text{ kg} \equiv m_{d,yy}^*. \end{aligned}$$

5.4 Esercizio 4

1. Dato che a 300 K la costante di Hall è nulla

$$R_H = \frac{1}{q} \frac{p\mu_p^2 - n\mu_n^2}{(p\mu_p + n\mu_n)^2} = 0$$

si ha che

$$p\mu_p^2 - n\mu_n^2 = 0$$

da cui

$$\frac{n}{p} = \left(\frac{\mu_p}{\mu_n} \right)^2 = 25^2 = 625$$

e quindi risulta $n = 625 p$. Essendo $n > p$, il semiconduttore è **drogato di tipo n**.

2. Per la legge d'azione di massa, $np = n_i^2$, e

$$n_i = \sqrt{N_C N_V} e^{-\frac{E_G}{2k_B T}}$$

si ha

$$n_i^2 = N_C N_V e^{-\frac{E_G}{k_B T}} = 4,0 \times 10^{24} \text{ m}^{-3} \cdot 2,0 \times 10^{23} \text{ m}^{-3} \cdot e^{-\frac{1,0 \cdot 11605}{300}} = 1,26 \times 10^{31} \text{ m}^{-6}.$$

Sostituendo la densità di buche tramite la relazione $n = 625p$ si ottiene $p^2 = n_i^2/625$ e quindi

$$p = \frac{n_i}{25} = \frac{\sqrt{1,26 \times 10^{31} \text{ m}^{-6}}}{25} = \boxed{1,42 \times 10^{14} \text{ m}^{-3}}$$

e anche

$$n = 625 \cdot p = \boxed{8,9 \times 10^{16} \text{ m}^{-3}}.$$

3. Sfruttando il rapporto tra le mobilità dei portatori, le conducibilità intrinseca ed estrinseca sono date da

$$\sigma_{intr} = e n_i (\mu_n + \mu_p) = e n_i \mu_n (1 + 25) = 26 e n_i \mu_n$$

e

$$\sigma_{estr} = e (n \mu_n + p \mu_p) = e p \mu_p \left(\frac{n \mu_n}{p \mu_p} + 1 \right) = e p \mu_p \left(625 \cdot \frac{1}{25} + 1 \right) = 26 e p \mu_p.$$

Il loro rapporto è

$$\frac{\sigma_{estr}}{\sigma_{intr}} = \frac{26 e p \mu_p}{26 e n_i \mu_n} = \frac{p \mu_p}{n_i \mu_n} = \frac{p}{n_i} \cdot 25$$

Dato che $n_i = 25p$:

$$\frac{\sigma_{estr}}{\sigma_{intr}} = \frac{p}{25p} \cdot 25 = \boxed{1}.$$