

Fisica della Materia Condensata.
Prof. Paola Gallo.
Prova del I appello di esame - 29 Gennaio 2021

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

Si abbia un campione con reticolo rettangolare di parametri reticolari a e b ($b < a$).

1. Calcolare i moduli dei primi quattro vettori di reticolo reciproco se il fattore di impacchettamento del reticolo è pari a 0.63. (5 punti)
2. Il cristallo viene studiato con il metodo delle polveri ($\lambda = 3 \text{ \AA}$) e il terzo picco si osserva ad un angolo $\theta = 60^\circ$. Quanto valgono i parametri reticolari a e b ? (5 punti)
3. Calcolare gli angoli a cui si osservano i successivi due picchi di diffrazione. (5 punti)

2 Esercizio 2

Una catena lineare monoatomica disposta lungo l'asse \hat{x} è libera di muoversi nel piano $\hat{x}\hat{y}$. Siano $a = 2 \text{ \AA}$ il parametro reticolare e $\rho = 13 \text{ u.m.a. \AA}^{-1}$ la densità lineare.

1. Quante branche e di che tipo sono presenti? Disegnare in forma schematica le curve di dispersione fononica nella Prima Zona di Brillouin. (2 punti)
2. Se a bordo zona i valori delle branche acustiche sono $\omega_{AL} = 2 \cdot 10^{13} \text{ rad/s}$ e $\omega_{AT} = 1.5 \cdot 10^{14} \text{ rad/s}$, quanto valgono le costanti di forza associate al moto lungo \hat{x} , α , e a quello lungo \hat{y} , β ? (4 punti)
3. Determinare la velocità del suono. (4 punti)

- Determinare la capacità termica per unità di volume a $T_1 = 400$ K, $T_2 = 3000$ K. (5 punti)

Nota aggiunta: per il calcolo della capacità termica nel modello di Debye utilizzare la seguente formula:

$$C_V(T) = \frac{4}{5} \pi^4 N K_B \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3.$$

3 Esercizio 3

Si abbia un cristallo bidimensionale quadrato disposto lungo il piano xy . Il passo reticolare è $a = 2$ Å. Su ogni sito reticolare è posto un atomo bivalente con orbitali p_x e d_{xy} . Siano dati $|\gamma_{p,x}| = 0.2$ eV in direzione x e $|\gamma_{p,y}| = 0.25$ eV in direzione y , $|\gamma_d| = 0.6$ eV, $E_p - \beta_p = 1.3$ eV, $E_d - \beta_d = 6.5$ eV, e si considerino nulli gli altri integrali.

- Ricavare la forma esplicita delle bande $E_p(\vec{q})$ e $E_d(\vec{q})$ in approssimazione di tight binding e con interazione a primi vicini. (5 punti)
- Disegnare le bande in direzione (1,0) e (0,1) e determinare se il cristallo si comporta come conduttore o isolante in tali direzioni. (5 punti)
- Calcolare la massa efficace degli elettroni di conduzione ai vertici della prima zona di Brillouin. (5 punti)

4 Esercizio 4

Si abbia un semiconduttore drogato la cui costante di Hall vale $R_H = 2$ C⁻¹m³ nella regione di temperature tra $T_1 = 200$ K e $T_2 = 350$ K. In tale regione il semiconduttore si trova in regime di saturazione.

- Determinare se il semiconduttore è drogato di tipo p o di tipo n e la concentrazione di atomi donori o accettori. (5 punti)
- Determinare l'energia della gap sapendo che le masse efficaci di elettroni e lacune sono uguali ed indipendenti dalla temperatura e che a T_2 la densità degli stati della banda di valenza vale 2.5×10^{22} m⁻³. (5 punti)
- Determinare la densità di portatori minoritari a $T_3 = 270$ K. (5 punti)

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

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

$$\begin{aligned} \vec{G} &= \vec{g}_1 + \vec{g}_2 \\ \vec{G} &= 2\vec{g}_1 \end{aligned}$$

di modulo

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

Per determinare in che ordine vanno messi questi due vettori rispetto agli altri si deve trovare il valore di a/b . Sfruttando l'informazione sul fattore di impacchettamento e considerando che in questo caso $R_{max} = b/2$

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

da cui

$$\frac{a}{b} = \frac{\pi}{4 \cdot 0.63} = 1.25.$$

Infine

$$\begin{aligned} G_1 &= \frac{2\pi}{a} \\ G_2 &= 1.25 G_1 \\ G_3 &= |g_1 + g_2| = 1.6 G_1 \\ G_4 &= 2 G_1. \end{aligned}$$

2. Il generico vettore del reticolo reciproco è

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

Essendo la base atomica $\vec{d}_0 = (0, 0)$, 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 che al terzo picco di diffrazione è associato il terzo vettore di reticolo reciproco più corto \vec{G}_1 . Invertendo la formula per la condizione di interferenza costruttiva

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

e utilizzando i valori noti di G_3 e $\theta^{(3)}$

$$|\vec{G}_3| = 1.6 \cdot \frac{2\pi}{a} = \frac{4\pi}{\lambda} \sin\left(\frac{\theta^{(3)}}{2}\right)$$

si ottiene

$$a = 1.6 \cdot \frac{\lambda}{2 \sin\left(\frac{\theta^{(3)}}{2}\right)} = 4.8 \text{ \AA}$$

e

$$b = \frac{a}{a/b} = 3.84 \text{ \AA}.$$

3. Per calcolare i valori degli angoli ai quali si osservano gli altri due picchi si sfruttano i vettori del reticolo reciproco ad essi associati, il quinto vettore di reticolo più corto è:

$$\vec{G} = 2 \cdot \vec{g}_1 + \vec{g}_2$$

di modulo

$$G_5 = |2 \cdot \vec{g}_1 + \vec{g}_2| = \sqrt{\left(\frac{4\pi}{a}\right)^2 + \left(\frac{2\pi}{b}\right)^2} = \sqrt{4 + \left(\frac{a}{b}\right)^2} G_1 = 2.35 G_1.$$

quindi gli angoli saranno:

$$\theta^{(4)} = 2 \arcsin \left(\frac{\lambda G_4}{4\pi} \right) = 2 \arcsin \left(\frac{\lambda 2 G_1}{4\pi} \right) = 77.4^\circ$$

$$\theta^{(5)} = 2 \arcsin \left(\frac{\lambda G_5}{4\pi} \right) = 2 \arcsin \left(\frac{\lambda 2.35 G_1}{4\pi} \right) = 94.5^\circ$$

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.
2. Data la relazione di dispersione

$$\omega(q) = A \sin \left(\frac{q a}{2} \right) \quad (1)$$

a bordo zona si ha

$$\omega(q) \Big|_{q=\frac{\pi}{a}} = A \sin \left(\frac{\pi}{2} \right) = A \quad (2)$$

In questo caso si ha

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

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

e, di conseguenza,

$$\alpha = \frac{M \omega_{AL}^2}{4} = 4.34 \cdot 10^3 \text{ dyne/cm},$$

$$\beta = \frac{M \omega_{AT}^2}{4} = 2.44 \cdot 10^5 \text{ dyne/cm}$$

essendo la massa M stata calcolata tramite la densità lineare ρ

$$\rho = \frac{M}{a} \quad \longrightarrow \quad M = \rho a = 13 \text{ u.m.a. } \text{\AA}^{-1} \cdot 2 \text{\AA} = 26 \text{ u.m.a.}$$

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

$$\omega(q) = A \sin \left(\frac{q a}{2} \right) \underset{q \sim 0}{\simeq} A \frac{q a}{2} = v_s q. \quad (3)$$

Di conseguenza

$$v_s^L = \sqrt{\frac{\alpha}{M}} a = 2 \cdot 10^5 \text{ cm/s},$$

$$v_s^T = \sqrt{\frac{\beta}{M}} a = 1.5 \cdot 10^6 \text{ cm/s}.$$

4. Calcolando la temperatura di Debye si capisce in che regime di temperature ci si trova (alto o basso rispetto a θ_D).

In una dimensione vale la relazione

$$N = \frac{L}{\pi} q = \frac{N a}{\pi} q \quad \longrightarrow \quad q_D = \frac{\pi}{a}$$

dove L è la lunghezza della catena.
Sfruttando poi le relazioni

$$\hbar \omega_D = K_B \theta_D$$

e

$$\omega_D = v_s q_D,$$

si ha

$$\begin{aligned} \theta_D^{L,T} &= \frac{\hbar \omega_D^{L,T}}{K_B} = \frac{\hbar v_s^{L,T} q_D}{K_B} = \\ &= \frac{\pi \cdot 1.05 \cdot 10^{-27} \text{ erg s}}{2.00 \cdot 10^{-8} \text{ cm} \cdot 1.38 \cdot 10^{-16} \text{ erg K}^{-1}} v_s^{L,T} = \begin{cases} 2.4 \cdot 10^2 \text{ K} & \text{longitudinale} \\ 1.79 \cdot 10^3 \text{ K} & \text{trasversale} \end{cases} \end{aligned}$$

Alla temperatura T_1 , il contributo fononico sarà differente per le due branche acustiche. Per quella longitudinale si usa la legge di Dulong-Petit, per quella trasversale la formula di Debye. Si avrà dunque

$$\begin{aligned} \frac{C_V^{TOT}(T)}{V} &= \frac{C_V^{AL}(T) + C_V^{AT}(T)}{V} \Big|_{T_1} = \\ &= \frac{1}{a} K_B + \frac{4 \cdot \pi^4}{5} \frac{K_B}{a} \left(\frac{T_1}{\theta_D^T} \right)^3 = \\ &= (6.9 \cdot 10^{-9} + 6 \cdot 10^{-9}) \text{ erg K}^{-1} \text{ cm}^{-1} = \\ &= 1.29 \cdot 10^{-8} \text{ erg K}^{-1} \text{ cm}^{-1}. \end{aligned}$$

A T_2 si è in regime di alte temperature. Per entrambi i contributi fononici si usa la legge di Dulong-Petit.

$$\begin{aligned} \frac{C_V^{TOT}(T)}{V} &= \frac{C_V^{AL}(T) + C_V^{AT}(T)}{V} \Big|_{T_2} = \\ &= \frac{2}{a} K_B = 1.38 \cdot 10^{-8} \text{ erg K}^{-1} \text{ cm}^{-1}. \end{aligned}$$

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 $\vec{R} = (\pm a, 0)$ e $\vec{R} = (0, \pm a)$. Dati i

segni dei lobi, gli integrali di trasferimenti riguardanti gli orbitali p_x sono positivo lungo la direzione y e negativo lungo la direzione x

$$\begin{aligned}\gamma_{p_x,x} &< 0 \\ \gamma_{p_x,y} &> 0\end{aligned}$$

mentre i segni degli integrali di trasferimento riguardandti gli orbitali d_{xy} sono negativi

$$\begin{aligned}\gamma_{d_{xy},x} &< 0 \\ \gamma_{d_{xy},y} &< 0.\end{aligned}$$

La banda originata dagli orbitali p_z ha la forma

$$E_p(q) = E_p - \beta_p + 2|\gamma_{p_x,x}| \cos(q_x a) - 2|\gamma_{p_x,y}| \cos(q_y a)$$

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

$$E_d(q) = E_d - \beta_d + 2|\gamma_{d_{xy},x}| \cos(q_x a) + 2|\gamma_{d_{xy},y}| \cos(q_y a).$$

Notare che, data la simmetria del problema $|\gamma_{d_{xy},x}| = |\gamma_{d_{xy},y}|$.

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

$$E_p(0,0) = E_p - \beta_p + 2|\gamma_{p_x,x}| - 2|\gamma_{p_x,y}| = 1.2 \text{ eV},$$

al bordo zona di Brillouin in direzione (1,0) vale:

$$E_p\left(\frac{\pi}{a}, 0\right) = E_p - \beta_p - 2|\gamma_{p_x,x}| - 2|\gamma_{p_x,y}| = 0.4 \text{ eV}.$$

al bordo zona di Brillouin in direzione (0,1) vale:

$$E_p\left(0, \frac{\pi}{a}\right) = E_p - \beta_p + 2|\gamma_{p_x,x}| + 2|\gamma_{p_x,y}| = 2.2 \text{ eV}.$$

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

$$E_d(0,0) = E_d - \beta_d + 2|\gamma_{d_{xy},x}| + 2|\gamma_{d_{xy},y}| = 8.9 \text{ eV}.$$

$$E_d\left(\frac{\pi}{a}, 0\right) = E_d - \beta_d - 2|\gamma_{d_{xy},x}| + 2|\gamma_{d_{xy},y}| = 6.5 \text{ eV}$$

$$E_d\left(0, \frac{\pi}{a}\right) = E_d - \beta_d - 2|\gamma_{d_{xy},x}| + 2|\gamma_{d_{xy},y}| = 6.5 \text{ eV}.$$

La banda p_x 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_x , piena perché gli atomi sono bivalenti, il cristallo si comporta come un isolante.

3. La massa efficace è data da

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

Data la forma funzionale della banda di energia, il tensore di massa efficace è diagonale e in questo caso si ha

$$\begin{aligned} m_{d,xx}^*(\vec{q} = (\pm \frac{\pi}{a}, \pm \frac{\pi}{a})) &= \hbar^2 \left[\frac{\partial^2 E_d(q)}{\partial q_x \partial q_x} \right]_{\Gamma}^{-1} = \frac{\hbar^2}{-2a^2 |\gamma_{d_{xy},x}| \cos(q_x a)} \Big|_{\Gamma} = \\ &= \frac{\hbar^2}{2a^2 |\gamma_{d_{xy},x}|} = 1.4 \cdot 10^{-30} \text{ kg}. \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} m_{d,yy}^*(\vec{q} = (\pm \frac{\pi}{a}, \pm \frac{\pi}{a})) &= \hbar^2 \left[\frac{\partial^2 E_d(q)}{\partial q_y \partial q_y} \right]_{\Gamma}^{-1} = \frac{\hbar^2}{-2a^2 |\gamma_{d_{xy},y}| \cos(q_y a)} \Big|_{\Gamma} = \\ &= \frac{\hbar^2}{2a^2 |\gamma_{d_{xy},y}|} = 1.4 \cdot 10^{-30} \text{ kg}. \end{aligned}$$

5.4 Esercizio 4

1. Nel regime intermedio (tra T_1 e T_2) la costante di Hall non varia con la temperatura. In generale il coefficiente di Hall è

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

Nel nostro caso abbiamo un semiconduttore drogato di tipo p perché la costante di Hall è positiva e la densità di portatori maggioritari è pari al drogaggio:

$$R_H = \frac{1}{e N_A}.$$

Invertendo di ottiene

$$N_A = \frac{1}{e R_H} = 3.13 \times 10^{18} \text{ m}^{-3}.$$

2. A T_2 sia ha il passaggio dal regime intermedio di saturazione al regime intrinseco. Dal momento che le masse efficaci dei portatori sono uguali tra di loro e per ogni valore della temperatura, si ha che le densità di portatori sono uguali tra di loro

$$N_C(T) = N_V(T).$$

Vale la seguente relazione

$$N_A = \sqrt{N_V(T_2) N_C(T_2)} e^{-\frac{E_g}{2 K_B T_2}} = N_V(T_2) e^{-\frac{E_g}{2 K_B T_2}},$$

che invertita permette di trovare l'energia di gap

$$E_g = -2 K_B T_2 \ln \left(\frac{N_A}{N_V(T_2)} \right) = 0.54 \text{ eV}.$$

3. Per la legge di azione di massa si ha

$$n(T)p(T) = n_i^2(T) = N_C(T)N_V(T)e^{-\frac{E_g}{K_B T}} = N_V^2(T)e^{-\frac{E_g}{K_B T}}.$$

Dato che le masse dei portatori sono uguali ad ogni temperatura, possiamo trovare $N_V(T_3)$ partendo dal valore noto a T_2

$$N_V(T_3) = N_V(T_2) \left(\frac{T_3}{T_2} \right)^{3/2} = 1.7 \times 10^{22} \text{ m}^{-3}.$$

T_3 si trova nella regione di saturazione, nella quale si ha $p \simeq N_A$. Si arriva quindi alla formula

$$n(T_3) = \frac{N_V^2(T_2) \left(\frac{T_3}{T_2} \right)^3 e^{-\frac{E_g}{K_B T_3}}}{N_A} = 8 \times 10^{15} \text{ m}^{-3}.$$