

# Raccolta Esami Scritti - Testi con soluzioni

Fisica della Materia Condensata

Dipartimento di Matematica e Fisica  
Università degli Studi Roma Tre

A.A. 2016/2017

# Raccolta Esami Scritti - Testi con soluzioni

Prova Scritta Appello III AA 2015/2016 . . . . .	1
Prova Scritta Appello IV AA 2015/2016 . . . . .	6
Prova Scritta Appello V AA 2015/2016 . . . . .	12

# Prova Scritta Appello III AA 2015/2016

## Esercizio 1

Il solido A è un metallo monoatomico e monovalente, con un reticolo cubico a corpo centrato con lato del cubo  $a$ , una densità di  $\rho = 5.4 \text{ g/cm}^3$ , una temperatura di Debye  $T_D = 200 \text{ K}$  e una temperatura di Fermi  $T_F = 8000 \text{ K}$ . Si sa inoltre che quando il cristallo viene irraggiato da un fascio di raggi X monocromatici di lunghezza d'onda  $\lambda = 1.54 \text{ \AA}$ , la posizione del primo picco di Bragg si osserva in corrispondenza dell'angolo  $\theta = 29.82^\circ$ . Si chiede di:

1. trovare il valore del parametro reticolare  $a$ ;
2. trovare il valore della velocità del suono;
3. valutare il contributo degli elettroni di conduzione alla capacità termica *per unità di massa* a volume costante  $c_V^{el}$  a  $T = 20 \text{ K}$ . Assumere che il contributo alla capacità termica a volume costante degli elettroni liberi sia data da:

$$C_V^{el} = \frac{3}{2}n(T)K_B$$

dove  $n(T)$  è la frazione di elettroni quantisticamente eccitabili alla temperatura  $T$ .

## Esercizio 2

Sia dato un cristallo unidimensionale di passo reticolare  $a = 2\text{\AA}$  composto di atomi monovalenti. Utilizzando l'approssimazione dell'elettrone quasi-libero, calcolare il valore della prima gap che si apre dovuta alla presenza di un potenziale periodico:

$$V(x) = A \cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right),$$

dove  $A = 13.6 \text{ eV}$ . Porsi nello schema a bande ridotte e disegnare qualitativamente l'andamento delle prime due bande di energia. Calcolare il vettore d'onda di Fermi e l'energia di Fermi del sistema. Questo cristallo è un conduttore o un isolante? Trovare infine l'energia della transizione *verticale* che avviene a  $k = k_F$  tra la prima e la seconda banda.

## Esercizio 3

In un semiconduttore a  $300 \text{ K}$  il rapporto tra le mobilità degli elettroni e delle lacune vale  $\mu_n/\mu_p = 20$ , l'energia della gap vale  $E_G = 1.53 \text{ eV}$ , il coefficiente di Hall è nullo, le densità degli stati in banda di conduzione e valenza sono rispettivamente  $N_C = 4 \cdot 10^{23} \text{ m}^{-3}$  e  $N_V = 6 \cdot 10^{24} \text{ m}^{-3}$ .

Determinare:

1. se il semiconduttore è intrinseco o meno ed eventualmente se di tipo  $n$  o  $p$ ;
2. la concentrazione di elettroni e lacune (in caso di drogaggio considerare tutte le impurezze ionizzate);
3. il rapporto tra la conducibilità intrinseca e quella estrinseca  $\sigma_{estr}/\sigma_{int}$  del semiconduttore.

## Costanti e fattori di conversione

$$e = 1.6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$$

$$m_e = 9.1 \cdot 10^{-31} \text{ Kg}$$

$$K_B = 1.38 \cdot 10^{-23} \text{ J/K} = 8.62 \cdot 10^{-5} \text{ eV/K}$$

$$\hbar = 1.054 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s} = 6.58 \cdot 10^{-16} \text{ eV}\cdot\text{s}$$

$$1 \text{ eV} = 11605 \text{ K}$$

---

## Soluzione Esercizio 1

1. Il reticolo *bcc* ha reticolo reciproco di simmetria *fcc*. Il primo picco diffrattivo è associato al più corto vettore del reticolo reciproco. Nell'*fcc* è il vettore che dato un vertice della cella cubica, punta al centro di una delle tre facce adiacenti tale vertice. Nella terna *xyz* si scrive come:  $\vec{G}_1 = \frac{4\pi}{a} \left( \frac{\hat{x}}{2} + \frac{\hat{y}}{2} \right)$  con modulo pari a :  $G_1 = \frac{2\pi}{a} \sqrt{2}$

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

$$G_1 = 2k \sin(\theta_1/2) = \frac{4\pi}{\lambda} \sin(\theta_1/2)$$

Uguagliando si trova il valore del parametro reticolare:

$$a = \frac{\lambda}{\sqrt{2} \sin(\theta_1/2)} = \frac{1.54 \text{ \AA}}{\sqrt{2} \sin(29.82^\circ/2)} = 4.23 \text{ \AA}$$

2. La velocità del suono nel modello di Debye, supponendo che le tre branche siano degeneri in quanto non viene specificato, si può ricavare dalla relazione:  $K_B T_D = \hbar v_s k_D$ . In 3D, il vettore d'onda di Debye è dato da:

$$k_D = \sqrt[3]{6\pi^2 n_{at}} = 1.16 \cdot 10^{10} \text{ m}^{-1}$$

dove  $n_{at} = \frac{2}{a^3} = 2.64 \cdot 10^{22} \text{ atomi/cm}^3$  è la densità atomica del cristallo *bcc* con base monoatomica. La velocità del suono risulta dunque:

$$v_s = \frac{K_B T_D}{\hbar k_D} = \frac{1.38 \cdot 10^{-23} \text{ J/K} \cdot 200 \text{ K}}{1.054 \cdot 10^{-34} \text{ Js} \cdot 1.16 \cdot 10^{10} \text{ m}^{-1}} = 2257 \text{ m/s}$$

3. La frazione di elettroni eccitabili a temperatura *T* sono quelli che distano meno di  $K_B T$  dalla superficie di Fermi. Dunque:

$$n(T) \approx N \frac{T}{T_F}$$

dove *N* è il numero di elettroni nel cristallo. Poichè il metallo è monovalente ( $n_{el} = n_{at}$ ) si ha:

$$c_V^{el}(T) = \frac{C_V^{el}}{M} \approx \frac{3}{2} \frac{N}{M} \frac{T}{T_F} K_B = \frac{3}{2} \frac{N}{V} \frac{1}{\rho} \frac{T}{T_F} K_B = \frac{3}{2} \frac{n_{at}}{\rho} \frac{T}{T_F} K_B$$

A *T* = 20 K, si ottiene:

$$c_V^{el}(20K) = \frac{3}{2} \frac{2.64 \cdot 10^{22}}{5.4} \frac{20}{8000} 1.38 \cdot 10^{-16} \text{ erg/g}\cdot\text{K} = 2.53 \cdot 10^3 \text{ erg/g}\cdot\text{K}$$

## Soluzione Esercizio 2

Nel modello dell'elettrone quasi-libero, la prima gap si apre ai bordi della prima zona di Brillouin con ampiezza determinata dalla trasformata di Fourier del potenziale periodico perturbativo fatta rispetto al vettore di reticolo reciproco  $\vec{G}$  ( $G = \frac{2\pi}{a}$ ) che connette i bordi di tale zona. Scriviamo il potenziale evidenziando la dipendenza da questo vettore:

$$V(x) = A \frac{e^{i2\pi x/a} + e^{-i2\pi x/a}}{2} = V_G e^{iGx} + V_{-G} e^{-iGx}$$

da cui si ricavano i coefficienti di Fourier:

$$V_G = V_{-G} = A/2 = 6.8 \text{ eV}$$

L'energia della gap a bordo della prima zona è data da :  $E_G = 2|V_G| = 13.6 \text{ eV}$ .

Ogni banda può contenere  $2N$  elettroni, e dunque l'ultima banda è semipiena essendo il solido costituito da atomi monovalenti. Il cristallo è dunque un metallo.

Gli stati a più alta energia occupati corrispondono a quelli con  $k = k_F$ . Determiniamo il momento di Fermi contando gli stati:

$$N = 2 \frac{2k_F}{\frac{2\pi}{L}} = \frac{2k_F Na}{\pi} \quad \rightarrow \quad k_F = \frac{\pi}{2a}$$

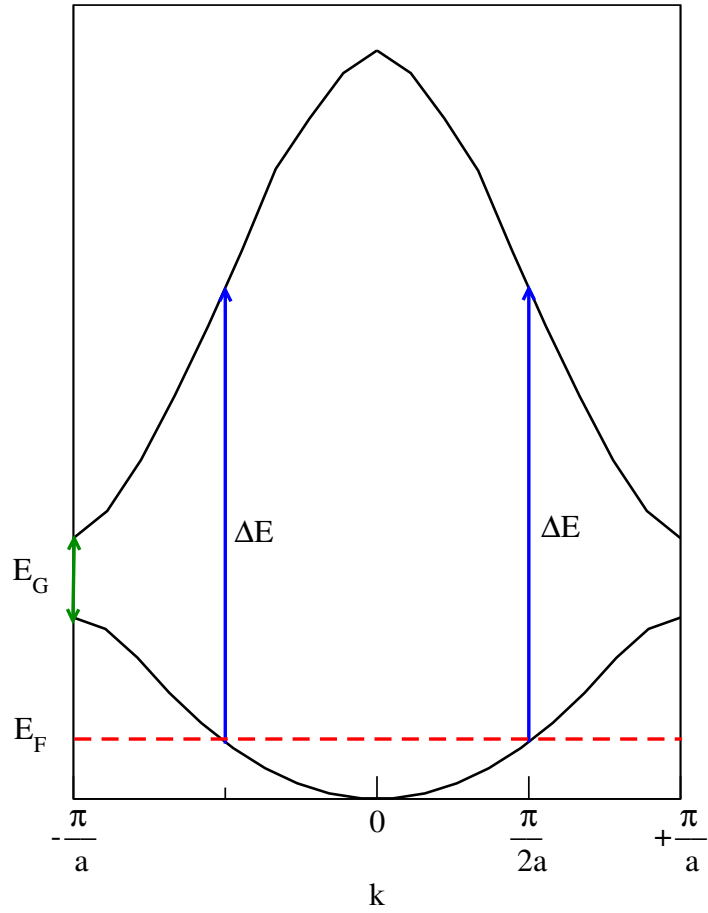
con energia:

$$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m_e} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8m_e a^2} = \frac{1.054 \cdot 10^{-34} \cdot 6.58 \cdot 10^{-16} \cdot \pi^2}{8 \cdot 9.1 \cdot 10^{-31} \cdot 4 \cdot 10^{-20}} \text{ eV} = 2.35 \text{ eV}$$

L'andamento qualitativo delle bande è mostrato in figura.

Sono possibili due transizioni verticali tra le due bande in corrispondenza due valori  $k = \pm k_F$  degeneri in energia. Studiamo quella per  $k = k_F$ . L'energia dell'elettrone nei due stati (prima e seconda banda) si ottiene valutando l'energia dell'elettrone libero perchè le correzioni alla legge di dispersione  $E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}$  sono forti solo a bordo zona. Lo stato di partenza ha vettore d'onda  $k_F$ , lo stato d'arrivo, corrispondente alla seconda banda  $k = k_f - G = \frac{\pi}{2a} - \frac{2\pi}{a} = -\frac{3\pi}{2a}$ . L'energia della transizione risulta quindi:

$$\Delta E = \frac{\hbar^2}{2m_e} \left[ \left( -\frac{3\pi}{2a} \right)^2 - \left( \frac{\pi}{2a} \right)^2 \right] = \frac{\hbar^2}{m_e} \frac{\pi^2}{a^2} = 8 E_F = 18.8 \text{ eV}$$



### Soluzione Esercizio 3

1. Dalla costante di Hall, nulla a 300 K, si ricava:

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

$$\frac{p}{n} = \left(\frac{\mu_n}{\mu_p}\right)^2 = 400 \quad \rightarrow \quad p = 400n$$

$p > n$ , il semiconduttore è drogato e di tipo  $p$ .

2. Per la legge d'azione di massa si ha:

$$np = n_i^2 = N_C N_V \exp\left(-\frac{E_G}{K_B T}\right) = 4 \cdot 10^{23} 6 \cdot 10^{24} \exp\left(-\frac{1.53 \cdot 11605}{300}\right) \text{ m}^{-6} = 4.75 \cdot 10^{22} \text{ m}^{-6}$$

inoltre dal punto 1 :  $p = 400n$ , dunque:

$$n = \left(\frac{4.75 \cdot 10^{22} \text{ m}^{-6}}{400}\right)^{1/2} = 1.1 \cdot 10^{10} \text{ m}^{-3}$$

$$p = 4.4 \cdot 10^{12} \text{ m}^{-3}$$

3. La conducibilità intrinseca e quella estrinseca sono date da:

$$\sigma_{intr} = en_i(\mu_n + \mu_p) = en_i\mu_p(20 + 1) = 21en_i\mu_p$$

$$\sigma_{estr} = e(n\mu_n + p\mu_p) = en\mu_n\left(1 + \frac{p}{n} \frac{\mu_p}{\mu_n}\right) = en\mu_n(1 + 400/20) = 21en\mu_n$$

Da cui il rapporto che veniva richiesto:

$$\frac{\sigma_{estr}}{\sigma_{intr}} = \frac{n_i}{n} \frac{\mu_p}{\mu_n} = \frac{20n}{n} \frac{1}{20} = 1$$

# Prova Scritta Appello IV AA 2015/2016

## Esercizio 1

Un cristallo ha reticolo cubico semplice con base biatomica. Il lato della cella cubica vale  $a = 4 \text{ \AA}$ . All'interno della cella primitiva l'atomo 1 (fattore di forma  $f_1$ ) è individuato dal vettore  $d_1 = a(0, 0, 0)$ , l'atomo 2 (fattore di forma  $f_2 = 2f_1$ ) è individuato dal vettore  $d_2 = \frac{a}{2}(1, 1, 1)$ .

Le leggi di dispersione di fononi acustici (AC) e di fononi ottici (OT) sono date da:

$$\hbar\omega_{AC} = A \sin\left(\frac{qa}{2}\right)$$

$$\hbar\omega_{OT} = B$$

dove  $A = 1 \cdot 10^{-2} \text{ eV}$  e  $B = 9 \cdot 10^{-2} \text{ eV}$ .

1. Calcolare il fattore di struttura del reticolo e studiarne le riflessioni. Calcolare l'intensità e l'angolo al quale si osserva il primo anello di diffrazione quando viene usata una lunghezza d'onda  $\lambda = 2 \text{ \AA}$ .
2. Determinare la velocità del suono  $v_s$ .
3. La temperatura di Einstein  $\Theta_E$  del cristallo.
4. Trovare il calore specifico ad alta temperatura ( $T \gg \Theta_E$ ) sapendo che il campione è costituito da  $10^{40}$  celle cubiche.

## Esercizio 2

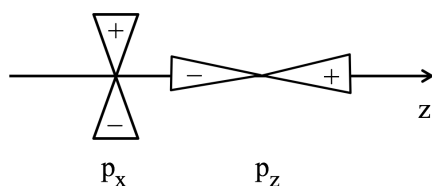
In un reticolo lineare monoatomico di passo reticolare  $a$  disposto lungo l'asse  $z$ , la banda di più bassa energia deriva da orbitali di tipo  $p_z$  e quella a più alta energia da orbitali di tipo  $p_x$  mostrati in figura. Gli atomi hanno valenza 2.

1. Utilizzando il modello del legame forte (tight binding):

$$\epsilon_i(q) = E_i - \gamma_i \sum_r e^{iqr}$$

e limitando l'interazione ai primi vicini, scrivere l'espressione delle due bande e disegnare qualitativamente il loro andamento nella prima zona di Brillouin, sapendo che  $|\gamma_{p_z}| = 0.3 \text{ eV}$ ,  $|\gamma_{p_x}| = 0.5 \text{ eV}$ ,  $E_{p_z} = 1 \text{ eV}$  e che l'energia della gap vale  $E_G = 0.46 \text{ eV}$ .

2. Calcolare l'energia di Fermi del sistema  $E_F$ . Questo cristallo è un metallo o un isolante?
3. Trovare la massima differenza di energia tra la seconda e la prima banda.
4. Scrivere l'espressione della banda derivante da orbitali  $p_x$  nell'approssimazione a secondi vicini. L'integrale di sovrapposizione tra secondi vicini vale  $\gamma_{p_x,2} = +0.25 \text{ eV}$ . Le proprietà del cristallo cambiano?





### Esercizio 3

Un semiconduttore viene drogato con atomi donori in concentrazione  $N_D = 0.5 N_{\text{Mott}}$ , dove  $N_{\text{Mott}} = 3.74 \cdot 10^{24} \text{ m}^{-3}$  è la concentrazione a cui avviene la transizione di Mott. Il semiconduttore ha una costante dielettrica relativa  $\epsilon_r = 12$ . La massa efficace degli elettroni è  $m_e^* = 0.6 m_0$  e si assume costante in temperatura.

1. Determinare il numero quantico  $n$  dei livelli delle impurezze;
2. Determinare la concentrazione di elettroni a  $T = 20 \text{ K}$ , sapendo che a questa temperatura il semiconduttore si trova nel regime di basse temperature.
3. Calcolare la costante di Hall nel regime di temperature intermedie e a  $T = 20 \text{ K}$ .

### Costanti e fattori di conversione

$$e = 1.6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$$

$$m_0 = 9.1 \cdot 10^{-31} \text{ Kg}$$

$$K_B = 1.38 \cdot 10^{-23} \text{ J/K} = 8.62 \cdot 10^{-5} \text{ eV/K}$$

$$\hbar = 1.054 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s} = 6.58 \cdot 10^{-16} \text{ eV}\cdot\text{s}$$

$$1 \text{ eV} = 11605 \text{ K}$$

$$1 R_y = 13.6 \text{ eV}$$

$$a_B = 0.5 \text{ \AA}$$

### Soluzioni

#### Soluzione Esercizio 1

1. Il reticolo cubico (*sc*) ha reticolo reciproco cubico. Indicando con  $\{g_1, g_2, g_3\}$  i vettori di base del reticolo reciproco e con  $\vec{G} = h\vec{g}_1 + k\vec{g}_2 + l\vec{g}_3$  il generico vettore di questo reticolo, il fattore di struttura del cristallo si scrive come:

$$F(\vec{G}) = N \sum_i f_i e^{-i\vec{G}\cdot\vec{d}_i} = N \left( f_1 + f_2 e^{-i\vec{G}\cdot\vec{d}_2} \right) = N f_1 \left( 1 + 2e^{-i\pi(h+k+l)} \right)$$

Esso risulta sempre differente da zero, dunque sono permesse tutte le riflessioni.

Il primo picco diffrattivo è associato al più corto vettore del reticolo reciproco. Nel reticolo *sc* esso coincide con uno qualsiasi dei lati della cella cubica. Nella terna *xyz* possiamo scriverlo come  $\vec{G}_1 = \vec{g}_1 = \frac{2\pi}{a} (100)$  con modulo pari a :  $G_1 = \frac{2\pi}{a}$

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

$$G_1 = 2k \sin(\theta_1/2) = \frac{4\pi}{\lambda} \sin(\theta_1/2)$$

Uguagliando le espressioni di  $G_1$  si trova il valore dell'angolo richiesto:

$$\theta_1 = 2 \arcsin \left( \frac{\lambda}{2a} \right) = 2 \arcsin(0.5) = 60^\circ$$

L'intensità della riflessione è:

$$I_1 \sim |F(G_1)|^2 \sim |Nf_1(1 + 2e^{-i\pi})|^2 \sim (Nf_1)^2$$

2. La velocità del suono si ricava dalla frequenza acustica nel limite di piccoli  $q$ :

$$v_s = \left( \frac{\partial \omega_{AC}}{\partial q} \right)_{q=0} = \frac{A a}{\hbar 2} = \frac{1 \cdot 10^{-2} \cdot 2 \cdot 10^{-10}}{6.58 \cdot 10^{-16} \cdot 2} \text{ m/s} = 1520 \text{ m/s}$$

3. La temperatura di Einstein si ricava dalla relazione:  $K_B \Theta_E = \hbar \omega_E$ . La frequenza di Debye si può stimare dalla frequenza del modo ottico:  $\omega_E = \omega_{OTT}$ . La temperatura di Einstein è dunque:

$$\Theta_E = \frac{\hbar \omega_E}{K_B} = \frac{9 \cdot 10^{-2}}{8.62 \cdot 10^{-5}} \text{ K} = 1044 \text{ K}$$

4. Nel limite di alte temperature ( $T \gg \Theta_E$ ) il calore specifico si trova con la legge di Dulong-Petit. Il cristallo possiede  $N$  modi acusti ed  $N$  ottici per cui:

$$c_V = 6NK_B = 6 \cdot 10^{40} \cdot 1.38 \cdot 10^{-23} \text{ J/K} = 8.28 \cdot 10^{17} \text{ J/K}$$

## Soluzione Esercizio 2

1. Nella catena lineare i primi vicini si trovano in  $R = \pm a$ . Quindi l'espressione della banda originata da orbitali di tipo  $i = p_z, p_x$  è:

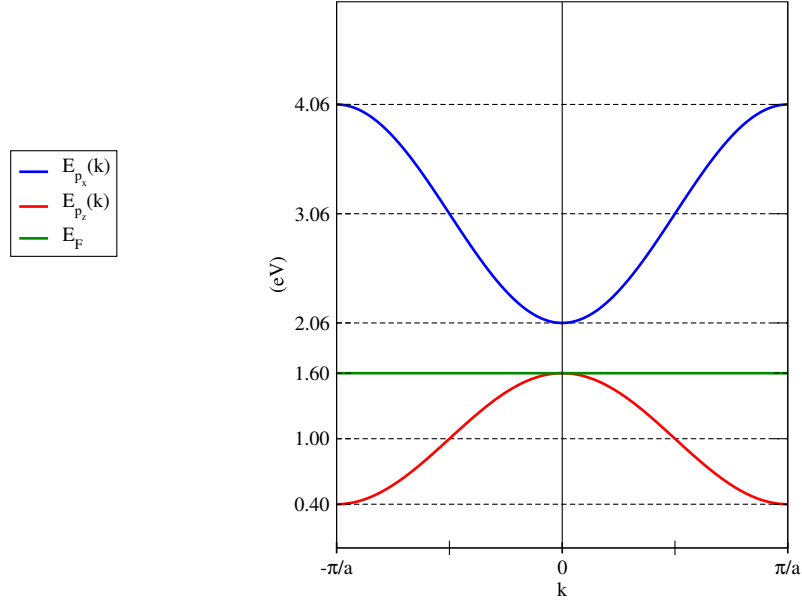
$$\epsilon_i(q) = E_i - \gamma_i (e^{iqa} + e^{-iqa}) = E_i - 2\gamma_i \cos(qa) \quad (1)$$

L'integrale di sovrapposizione fra gli orbitali  $p_z$  è negativo ( $\gamma_{p_z} < 0$ ) mentre quello tra orbitali  $p_x$  è positivo ( $\gamma_{p_x} > 0$ ), dunque le due bande sono:

$$\epsilon_{p_z}(q) = E_{p_z} + 2|\gamma_{p_z}| \cos(qa) \quad (2)$$

$$\epsilon_{p_x}(q) = E_{p_x} - 2|\gamma_{p_x}| \cos(qa) \quad (3)$$

Le due bande sono mostrate in figura.



2. Gli atomi del cristallo sono bivalenti, perciò dobbiamo posizionare  $2N$  elettroni nelle bande. Poiché le bande sono separate da una gap, i  $2N$  elettroni occuperanno tutta la banda più bassa in energia ( $\epsilon_{p_z}$ ) mentre la banda  $\epsilon_{p_x}$  risulterà completamente vuota. Segue che l'energia di Fermi è pari a quella dello stato occupato in banda  $p_z$  di massima energia. Ciò avviene in  $q = 0$ :  $E_F = \epsilon_{p_z}(0) = 1.60$  eV.

Dato che l'ultimo stato occupato è separato dal primo stato libero da una gap finita il cristallo è un isolante.

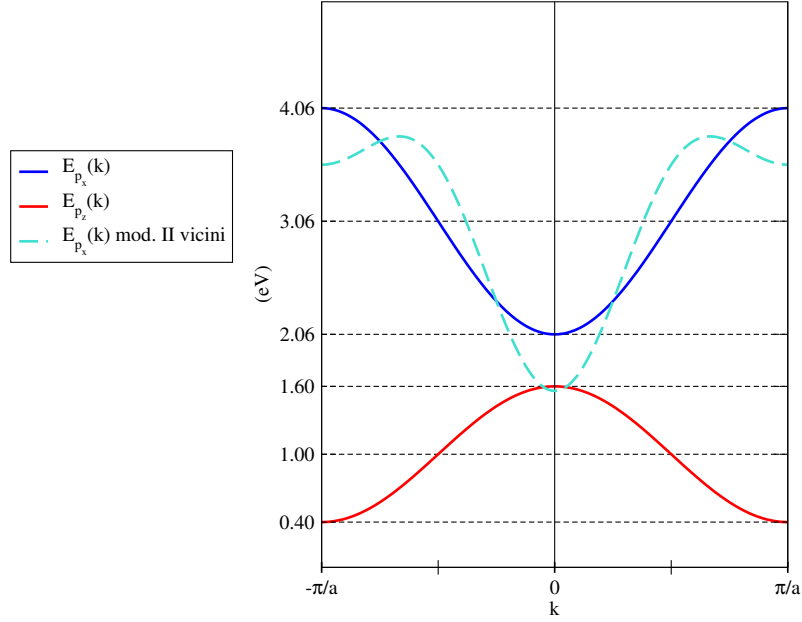
3. La gap massima di energia si trova a bordo zona e vale 3.66 eV.
4. Nella catena lineare i secondi vicini si trovano in  $R = \pm 2a$ . La banda  $p_x$  nell'approssimazione a secondi vicini diventa:

$$\epsilon_{p_x}(q) = E_{p_x} - \gamma_{p_x} (e^{iqa} + e^{-iqa}) - \gamma_{p_x,2} (e^{i2qa} + e^{-i2qa}) \quad (4)$$

$$= E_{p_x} - 2\gamma_{p_x} \cos(qa) - 2\gamma_{p_x,2} \cos(2qa) \quad (5)$$

$$= E_{p_x} - 2|\gamma_{p_x}| \cos(qa) - 2|\gamma_{p_x,2}| \cos(2qa) \quad (6)$$

Le nuova banda è mostrata in figura.



In questa nuova configurazione c'è sovrapposizione di banda, dunque il cristallo si comporta come un metallo.

### Soluzione Esercizio 3

1.

$$N_{\text{Mott}} = \left( \frac{4}{3} \pi a_n^2 \right)^{-1} \quad \rightarrow \quad a_n = \left( \frac{4}{3} \pi N_{\text{Mott}} \right)^{-1/3} = 4 \text{ nm}$$

$$n^2 = \frac{m_e^* a_n}{m_0 a_B \epsilon_r} = 0.6 \cdot \frac{40}{0.5} \cdot \frac{1}{12} = 4$$

Il numero quantico è dunque  $n = 2$ .

2. Nel regime di basse temperature la densità degli elettroni è :

$$n(T) = \sqrt{\frac{N_C(T) N_D}{2}} e^{-\frac{\epsilon_D}{2k_B T}} \quad \text{con} \quad N_C(T) = 2.354 \left( \frac{m_e^* T}{m_0 300 \text{ K}} \right)^{3/2} \cdot 10^{25} \text{ m}^{-3} \quad (7)$$

Troviamo l'energia di legame  $\epsilon_D$  e la densità di stati in banda di conduzione a 20 K:

$$\epsilon_D = \frac{R_y a_B}{\epsilon_r a_n} = \frac{13.6 \cdot 0.5}{12 \cdot 40} = 14.5 \text{ meV}$$

$$N_C(20) = 2.354 \left( 0.6 \frac{20}{300} \right)^{3/2} \cdot 10^{25} \text{ m}^{-3} = 18.8 \cdot 10^{22} \text{ m}^{-3}$$

La densità degli elettroni risulta dunque:

$$n(20) = \sqrt{\frac{18.8 \cdot 1.87}{2}} e^{-\frac{0.0145}{40 \cdot 8.62 \cdot 10^{-5}}} \cdot 10^{23} \text{ m}^{-3} = 6.25 \cdot 10^{21} \text{ m}^{-3}$$

3. La costante di Hall in presenza di due portatori ( $p$  lacune e  $n$  elettroni) nel sistema SI si scrive:

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

Nel regime intermedio i portatori maggioritari sono gli elettroni con concentrazione pari al drogaggio  $n = N_D$ . Nel regime a basse temperature i portatori maggioritari sono sempre gli elettroni ma la loro concentrazione è data dalla formula 7. In entrambi i regimi si possono trascurare le lacune minoritarie per cui:

$$\text{Regime intermedio: } R_H = -\frac{1}{qN_D} = -\frac{1}{1.6 \cdot 10^{-19} \cdot 1.87 \cdot 10^{24}} \text{ C}^{-1}\text{m}^3 = -3.34 \cdot 10^{-6} \text{ C}^{-1}\text{m}^3$$

$$\text{Regime basse temperature } T = 20 \text{ K: } R_H = -\frac{1}{qn(20)} = -\frac{1}{1.6 \cdot 10^{-19} \cdot 6.25 \cdot 10^{21}} \text{ C}^{-1}\text{m}^3 = -1000 \text{ C}^{-1}\text{m}^3$$

# Prova Scritta Appello V AA 2015/2016

## Esercizio 1

Si abbia un campione di Oro di volume  $V = 2 \text{ cm}^3$  alla temperatura di 10 K. Il peso atomico dell'Oro è 197 uma. L'Oro ha reticolo FCC e la distanza fra due atomi primi vicini vale  $d_{nn} = 2.882 \text{ \AA}$ .

1. Trovare la capacità termica per unità di massa in approssimazione di Debye, sapendo che la velocità del suono nel cristallo vale  $v_s = 3.2 \cdot 10^5 \text{ cm/s}$ .
2. Sapendo che la posizione del primo anello di diffrazione è  $\theta_1 = 42.2^\circ$ , calcolare il valore della lunghezza d'onda  $\lambda$  con cui si esegue l'esperimento e il rapporto fra le intensità del primo e del secondo ordine di diffrazione che si osservano.

## Esercizio 2

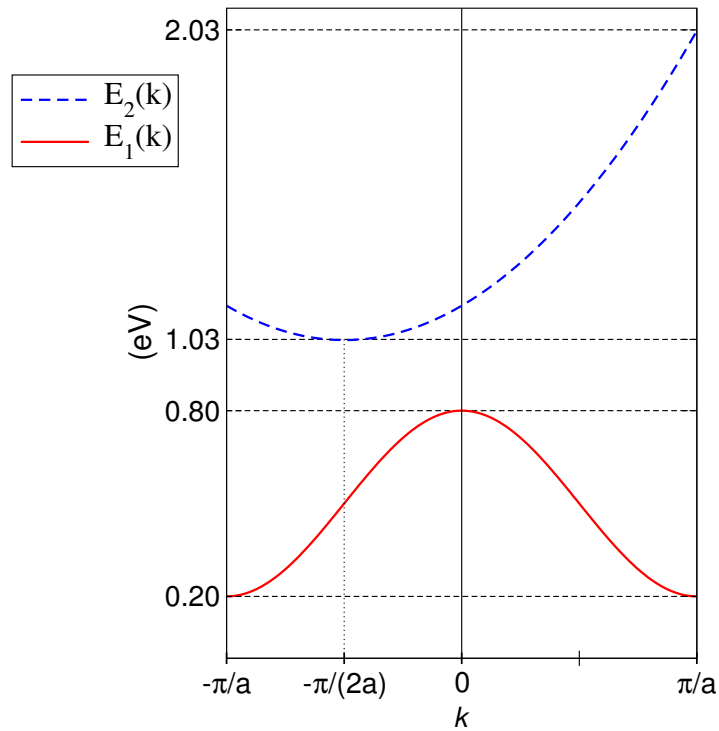
Si abbia un semiconduttore drogato. Esclusivamente tra  $T_1 = 300 \text{ K}$  e  $T_2 = 150 \text{ K}$  la costante di Hall del campione risulta costante e vale  $R_H = 0.21 \text{ C}^{-1}\text{m}^3$ . Inoltre è noto che le masse efficaci dei portatori sono uguali tra loro.

1. Determinare il drogaggio che possiede il campione. Esso è di tipo  $p$  o di tipo  $n$ ?
2. Quanto vale l'energia di legame delle impurezze sapendo che la densità degli stati a  $T_2$  vale  $2.28 \cdot 10^{22} \text{ m}^{-3}$ ?
3. Quanto vale l'energia di gap  $\epsilon_g$  del semiconduttore?

## Esercizio 3

La struttura a bande di un un reticolo lineare monoatomico di passo reticolare  $a = 1 \text{ \AA}$  disposto lungo l'asse  $z$ , è mostrata in figura. La banda di più bassa energia  $E_1(k)$  deriva da orbitali di tipo  $p_z$  e quella a più alta energia è descritta in buona approssimazione dalla legge:  $E_2(k) = A(k + \frac{\pi}{2a})^2 + B$ . Gli atomi hanno valenza 1.

1. Scrivere l'espressione della banda  $E_1(k)$  derivante da orbitali di tipo  $p_z$  utilizzando il modello del legame forte (tight binding) e limitando l'interazione ai primi vicini. Specificare il segno e il valore numerico dell'integrale di sovrapposizione  $\gamma_{p_z}$ .
2. Calcolare l'energia di Fermi del sistema  $E_F$  e specificare i  $k$  degli stati occupati. Questo cristallo è un metallo o un isolante?
3. Trovare la massa efficace di un elettrone che si trova sul fondo della banda a più alta energia.
4. Come cambiano l'energia di Fermi e le proprietà del cristallo nel caso gli atomi abbiano valenza 2?



## Costanti e fattori di conversione

$$e = 1.6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$$

$$K_B = 1.38 \cdot 10^{-23} \text{ J/K} = 8.62 \cdot 10^{-5} \text{ eV/K}$$

$$\hbar = 1.054 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s} = 6.58 \cdot 10^{-16} \text{ eV}\cdot\text{s}$$

$$1 \text{ uma} = 1.6605 \cdot 10^{-24} \text{ g}$$

## Soluzioni

### Soluzione Esercizio 1

1)

Nell'*fcc* : (1) il lato della cella cubica  $a$  è legato alla distanza tra primi vicini  $d_{nn}$  dalla relazione:  $a = d \cdot \sqrt{2} = 4.076 \text{ \AA}$ , (2) la cella cubica contiene 4 atomi, quindi la densità atomica vale:  $n = \frac{4}{a^3} = \frac{4}{(d \cdot \sqrt{2})^3} = \frac{\sqrt{2}}{d_{nn}^3}$ .

Il vettore d'onda di Debye è dunque:  $q_D = \sqrt[3]{6\pi^2 n} = \frac{\sqrt[3]{6\pi^2 \sqrt{2}}}{d_{nn}} = 1.5181 \text{ \AA}^{-1}$  e la temperatura di Debye vale:  $\Theta_D = \frac{\hbar v_s q_D}{K_B} = 371 \text{ K}$

A 10 K vale l'approssimazione a basse temperature perchè  $10 \text{ K} \ll \Theta_D$ , dunque la capacità termica nel modello di Debye si scrive:

$$c_V(T) = \frac{12}{5} \pi^4 \left( \frac{T}{\Theta_D} \right)^3 N K_B \quad (8)$$

Nell'esercizio si chiedeva la capacità termica per unità di massa, che si scrive, indicando con  $M$  la

massa del campione :

$$c'_V(T) = \frac{c_V}{M} = \frac{c_V}{Nm_{cella}} = \frac{12}{5} \pi^4 \left( \frac{T}{\Theta_D} \right)^3 \frac{K_B}{m_{cella}} \quad (9)$$

Calcoliamo la massa:

$$m_{Au} = 197 \text{ uma} = 327.12 \cdot 10^{-27} \text{ kg} \quad (10)$$

$$m_{cella} = 4 \cdot m_{Au} = 1.308 \cdot 10^{-24} \text{ kg} \quad (11)$$

A  $T = 10 \text{ K}$  la capacità termica per unità di massa vale  $c'_V(10\text{K}) = 4.83 \cdot 10^{-2} \text{ J}/(\text{kg K})$

2)

Il reticolo *fcc* ha reticolo reciproco di simmetria *bcc*. I moduli dei due vettori più corti sono:

$$G_1 = \frac{2\pi\sqrt{3}}{a} = 2.670 \text{ \AA}^{-1} \quad (12)$$

$$G_2 = \frac{4\pi}{a} = 1.1547 G_1 = 3.083 \text{ \AA}^{-1} \quad (13)$$

inoltre (scattering):  $G_i = 2k \sin(\theta_i/2) = \frac{4\pi}{\lambda} \sin(\theta_i/2)$

Dalla posizione del primo ordine ricaviamo  $\lambda$ :

$$\lambda = \frac{4\pi}{G_1} \sin(\theta_1/2) = 1.69 \text{ \AA}$$

Poiché la base del reticolo è monoatomica ( $\vec{d}_0 = (000)$ ) e il reticolo semplice, il fattore di struttura è costante, infatti indicando con  $\{g_1, g_2, g_3\}$  i vettori di base del reticolo reciproco e con  $\vec{G} = h\vec{g}_1 + k\vec{g}_2 + l\vec{g}_3$  il generico vettore di questo reticolo, il fattore di struttura del cristallo si scrive come:

$$F(\vec{G}) = N \sum_i f_i e^{-i\vec{G} \cdot \vec{d}_i} = N f_0$$

L'intensità del picco è proporzionale al modulo quadro del fattore di struttura, ma essendo quest'ultimo indipendente dal particolare vettore di reticolo reciproco, il rapporto tra le intensità di due ordini qualsiasi vale sempre 1.

## Soluzione Esercizio 2

1)

Per un semiconduttore drogato la costante di Hall è costante in temperatura nel regime intermedio, ovvero quando la densità dei portatori maggioritari è pari al drogaggio. Poiché  $R_H > 0$  il drogaggio sarà di tipo *p* e vale:

$$N_A = \frac{1}{eR_H} = 2.98 \cdot 10^{19} \text{ m}^{-3}$$

2)

La temperatura  $T_2 = 150 \text{ K}$  segna il passaggio al regime di basse temperature, per cui a  $T = T_2$  vale:

$$N_A = \sqrt{\frac{N_V(T_2)N_A}{2}} e^{-\epsilon_a/(2K_B T_2)} \quad \text{con} \quad N_V(T_2) = 2.28 \cdot 10^{22} \text{ m}^{-3}$$



invertendo si trova:

$$\epsilon_a = -K_B T_2 \ln \left( \frac{2N_A}{N_V(T_2)} \right) = 77 \text{ meV}$$

**3)**

La temperatura  $T_1 = 300 \text{ K}$  segna invece il passaggio al regime di alte temperature, per cui a  $T = T_1$  vale:

$$N_A = \sqrt{N_V(T_1)N_C(T_1)}e^{-\epsilon_g/(2K_B T_1)} = N_V(T_1)e^{-\epsilon_g/(2K_B T_1)}$$

infatti poiché le masse dei portatori sono uguali ad ogni temperatura,  $N_V(T) = N_C(T)$ .

$$N_V(T_1) = N_V(T_2) \left( \frac{T_1}{T_2} \right)^{3/2} = 6.45 \cdot 10^{22} \text{ m}^{-3}$$

$$\epsilon_g = -2K_B T_1 \ln \left( \frac{N_A}{N_V(T_1)} \right) = 397 \text{ meV}$$

### Soluzione Esercizio 3

**1)**

Nella catena lineare i primi vicini si trovano in  $R = \pm a$ . Quindi l'espressione della banda originata da orbitali di tipo  $p_z$  è:

$$E_1(k) = E_{p_z} - \gamma_{p_z} (e^{ika} + e^{-ika}) = E_{p_z} - 2\gamma_{p_z} \cos(ka) \quad (14)$$

L'integrale di sovrapposizione fra gli orbitali  $p_z$  è negativo ( $\gamma_{p_z} < 0$ ), dunque la banda è:

$$E_1(k) = E_{p_z} + 2|\gamma_{p_z}| \cos(ka) \quad (15)$$

il valore di  $|\gamma_{p_z}|$  si ricavano dalla figura:

$$E_1(0) - E_1(\pi/a) = 4|\gamma_{p_z}| = 0.60 \text{ eV} \quad (16)$$

$$|\gamma_{p_z}| = 0.15 \text{ eV} \quad (17)$$

**2)**

Gli atomi del cristallo sono monovalenti, quindi gli  $N$  elettroni andranno ad occupare la banda  $E_1(k)$  dal suo minimo (che si trova a bordo zona) fino allo stato con vettore d'onda  $k_F = \frac{\pi}{2a}$  e energia pari all'energia di Fermi del sistema  $E_F$ . Gli stati occupati, sono quelli i cui  $k$  cadono dunque nell'intervallo:  $(-\frac{\pi}{a}, -\frac{\pi}{2a}) \cup (\frac{\pi}{2a}, \frac{\pi}{a})$ . L'energia di Fermi è:  $E_F = E_{p_z} + 2|\gamma_{p_z}| \cos(\pi/2) = E_{p_z} = 0.5 \text{ eV}$ . Dato che il livello di Fermi cade dentro la banda il cristallo è un metallo.

**3)**

La massa efficace richiesta è:

$$m^* = \hbar^2 \left[ \frac{\partial^2 E_2(k)}{\partial k^2} \right]_{k=-\pi/(2a)}^{-1} = \frac{\hbar^2}{2A}$$

il valore della costante  $A$  si ricava dal valore che assume la banda a  $k = \pi/a$ , e risulta  $A = 0.045$  eV·Å<sup>2</sup> e  $m^* = 7.7 \cdot 10^{-30}$  kg.

4)

Se gli atomi del cristallo sono bivalenti, i risultanti  $2N$  elettroni occuperanno tutta la banda a più bassa energia. Gli stati occupati sono quindi tutti quelli con  $k \in (-\pi/a, \pi/a)$ . Poiché questa banda è separata da una gap finita dalla banda a più alta energia, il cristallo è isolante.