Fisica della Materia Condensata

Prof. Paola Gallo

Prova del I appello di esame - 30 Gennaio 2017

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.

Esercizio 1

Due cristalli monoatomici sono studiati col metodo delle polveri. Un campione cristallizza nel diamante e l'altro nel cubo semplice. Il lato della cella cubica di entrambi i reticoli è $a = 5.5$ Å.

1. Calcolare i moduli dei tre vettori $\vec{G}_1, \vec{G}_2, \vec{G}_3$ di reticolo reciproco più corti per entrambi i reticoli.

2. Calcolare gli angoli ai quali vengono osservati i primi tre anelli di diffrazione per entrambi i reticoli, sapendo che $\lambda = 2$ Å.

3. Calcolare la *packing fraction* di entrambi i reticoli, motivando i passaggi.

Esercizio 2

Un solido monoatomico cristallizza nella struttura cubica a facce centrate, con temperatura di Debye $\Theta_D = 353$ K. La densità di massa del cristallo è $\rho = 8740$ kg/m^3 e la velocità del suono vale $v_s = 2860$ m/s. Assumendo che ognuna delle branche acustiche abbia la forma:

$$\omega(k) = \sqrt{\frac{4C}{m}} \sin\left(\frac{ka}{2}\right),$$

determinare:

1. la massa degli atomi che formano il cristallo,

2. la costante di forza C,

3. la capacità termica per unità di massa a T = 800 K.

4. Noto che il contributo reticolare all'energia interna per unità di massa si può scrivere come $u(T) = \alpha T^4$ [J/kg] nel limite di basse temperature, determinare la costante α.

Valori delle costanti:

$e = 1.6 \cdot 10^{-19}$ C
$m_0 = 9.11 \cdot 10^{-31}$ Kg
$\mathrm{k}_B = 1.38 \cdot 10^{-23}$ J/K $= 8.62 \cdot 10^{-5}$ eV/K
$\hbar = 1.054 \cdot 10^{-34}$ J s $= 6.583 \cdot 10^{-16}$ eV s

Esercizio 3

Considerate un reticolo cubico di costante reticolare $a = 2$ Å.

1. Scrivere la forma esplicita delle bande $E_{p_x}(\vec{k})$ e $E_{p_z}(\vec{k})$ risultanti nell'approssimazione a *tight binding* a primi vicini da funzioni di tipo p_x e di tipo p_z. Si trascurino le interazioni $p_x - p_z$. Utilizzare la formula:

$$E_i(\vec{k}) = E_{0i} - \sum_{\vec{R}} \gamma_i(R)\, e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}} \qquad\qquad i = p_x, p_z$$

   dove $\vec{R}$ indica la posizione dei primi vicini e γ_i é l'integrale di sovrapposizione (considerare $\gamma_i(R) = \gamma_i(-R)$).

2. Fare un grafico delle due bande nella direzione (100).

Dati : $E_{0p_x} = E_{0p_z} = 2$ eV, $|\gamma_{p_x,x}| = |\gamma_{p_z,z}| = 0.5$ eV, il modulo di tutti gli altri integrali di sovrapposizione fra primi vicini vale $|\gamma| = 0.4$ eV.

Considerate ora un cristallo unidimensionale con la struttura a bande appena disegnata (ovvero considerare le due bande lungo la direzione (100)), il cristallo è bivalente.

3. Determinare quali sono gli stati occupati specificando i valori del momento k e il tipo di banda (p_x e/o p_z) degli stati occupati, e trovare l'energia di Fermi E_{F} di questo cristallo unidimensionale.

4. Specificare il comportamento della catena a temperatura nulla e a un k_BT piccolo quanto si vuole. Motivare la risposta.

5. Calcolare la massa e la velocità degli elettroni che si trovano sul massimo della banda E_{p_x}.

Esercizio 4

Un semiconduttore viene drogato con atomi donori in concentrazione N_D. Si sappia che alle tre temperature $T_1 = 500$ K, $T_2 = 400$ K, e $T_3 = 250$ K, le prime due nella regione intrinseca del semiconduttore e T_3 nella regione estrinseca di temperature intermedie, le corrispondenti conducibilità del semiconduttore siano $\sigma_1 = 13\ \Omega^{-1}$/m, $\sigma_2 = 0.9\ \Omega^{-1}$/m e $\sigma_3 = 0.006\ \Omega^{-1}$/m. Le masse efficaci di elettroni e lacune non dipendono dalla temperatura.

1. Sapendo che le mobilità degli elettroni e delle lacune sono ben rappresentate dalle espressioni $\mu_n = \mu_{0,n}\,(T[\mathrm{K}]/300)^{-3/2}$ e $\mu_p = \mu_{0,p}\,(T[\mathrm{K}]/300)^{-3/2}$, determinare il valore dell'energia di gap, supposta indipendente dalla temperatura.

2. Calcolare il valore del potenziale chimico a T_2, sapendo che le relazioni di dispersione della banda di valenza e conduzione sono: $E_V(k) = E_V - \alpha k^2$ e $E_C(k) = E_C + \beta k^2$. $E_V = 632$ meV, $\alpha = \hbar^2/m_0$ e $\beta = 2\hbar^2/m_0$, dove m_0 è la massa dell'elettrone.

3. Il contributo dei portatori minoritari alla conducibilità elettrica a T_3, sapendo che $\mu_{0,p} = 0.36\ \mathrm{m^2V^{-1}s^{-1}}$.

Valori delle costanti:

$e = 1.6 \cdot 10^{-19}$ C
$m_0 = 9.11 \cdot 10^{-31}$ Kg
$\mathrm{k}_B = 1.38 \cdot 10^{-23}$ J/K $= 8.62 \cdot 10^{-5}$ eV/K
$\hbar = 1.054 \cdot 10^{-34}$ J s $= 6.583 \cdot 10^{-16}$ eV s