

Fisica della Materia Condensata.  
Prof. Paola Gallo.  
Prova del I appello di esame - 25 Gennaio 2023

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

Un cristallo  $AB_2$  ha struttura *fcc* e viene studiato con il metodo delle polveri. I tre atomi che costituiscono la base sono individuati dai vettori  $\vec{d}_A = \vec{0}$ ,  $\vec{d}_{B_1} = \frac{a}{4}(1, 1, 1)$  e  $\vec{d}_{B_2} = -\frac{a}{4}(1, 1, 1)$ . Il fattore di forma dell'atomo A sia il doppio di quello dell'atomo B.

1. Studiare il fattore di struttura del cristallo e determinare quali riflessioni sono permesse. (5 punti)
2. Determinare il rapporto tra le intensità dei picchi associati alle famiglie di piani  $\{1, 1, 1\}$  e  $\{1, 1, 3\}$ . (5 punti)
3. Il secondo picco si trova in corrispondenza dell'angolo  $\theta^{(2)} = 40^\circ$ . Determinare la lunghezza d'onda della radiazione incidente se il parametro reticolare del cristallo vale  $a = 6.2 \text{ \AA}$ . (5 punti)

## 2 Esercizio 2

Una catena lineare biatomica è disposta ed è libera di muoversi lungo l'asse  $\hat{x}$ . Siano  $M_A = 15 \text{ u.m.a.}$  e  $M_B = 28 \text{ u.m.a.}$  le masse degli atomi nella catena,  $\rho = 13 \cdot 10^{10} \text{ u.m.a.} \cdot \text{m}^{-1}$  la densità lineare di massa e  $C = 12 \cdot 10^2 \text{ dyne} \cdot \text{cm}^{-1}$  la costante di forza.

1. Ricavare la relazione di dispersione in approssimazione armonica e per interazione a primi vicini. Determinare i valori a bordo e a centro zona e disegnare le curve di dispersione fononica nella Prima Zona di Brillouin. (5 punti)
2. Determinare la temperature di Debye. (5 punti)

Supponendo ora di avere un solido con reticolo cubico con base biatomica, di densità  $\rho = 3 \text{ g/cm}^3$  e avente il parametro reticolare e la temperatura di Debye calcolati ai punti precedenti:

3. Determinare la capacità termica per unità di massa a  $T = 800 \text{ K}$ . (5 punti)

### 3 Esercizio 3

Gli stati elettronici di valenza di una catena lineare monoatomica con  $N = 10^{25}$  siti, di passo reticolare  $a = 0.25 \text{ nm}$  e disposta lungo l'asse  $z$ , sono ben descritti da due diversi orbitali su ciascun sito della catena. La banda che chiameremo A si origina da sovrapposizione di orbitali di tipo  $s$  e la banda B da orbitali di tipo  $p_z$ . Gli atomi della catena sono bivalenti. Utilizzando il modello del legame forte limitando l'interazione a primi vicini, trascurando gli integrali di sovrapposizione  $\alpha$  e considerando  $\beta_A = -1 \text{ eV}$  e  $\beta_B = 4 \text{ eV}$   $\gamma_A = 3 \text{ eV}$  e  $\gamma_B = -1 \text{ eV}$ :

1. Scrivere le espressioni delle due bande  $E_A(k)$  e  $E_B(k)$  e tracciarne un grafico approssimativo. (5 punti)
2. Si determini l'energia di Fermi  $E_F$  del sistema. (5 punti)
3. Indicare gli stati elettronici occupati su ciascuna banda e si stabilisca se il modello ha comportamento metallico o isolante. (5 punti)

### 4 Esercizio 4

Si consideri un semiconduttore drogato di tipo  $n$  con soli atomi donori. In tabella sono riportati i valori della concentrazione dei portatori maggioritari  $n$  del campione misurati a quattro diverse temperature e i dati della concentrazione di portatori intrinseci  $n_i$  misurati a tre temperature.

T [K]	100	200	400	500	1000
$n \text{ [cm}^{-3}\text{]}$	$2 \cdot 10^9$	$2 \cdot 10^{10}$	-	$2 \cdot 10^{10}$	$2 \cdot 10^{12}$
$n_i \text{ [cm}^{-3}\text{]}$	-	-	$2 \cdot 10^9$	$2 \cdot 10^{10}$	$2 \cdot 10^{12}$

1. Spiegare l'andamento di  $n$  in funzione della temperatura e calcolare l'energia della gap e il drogaggio del semiconduttore. (5 punti)
2. Calcolare la concentrazione di lacune  $p$  a  $T = 400 \text{ K}$ . (5 punti)
3. Calcolare la conducibilità totale del semiconduttore  $\sigma$  a  $T = 400 \text{ K}$ , sapendo che la massa efficace degli elettroni è  $m_e^* = 7.72 \cdot 10^{-32} \text{ kg}$  e il loro tempo medio di scattering è  $\tau = 0.1 \text{ ps}$ . (5 punti)

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

## 5 Soluzioni

### 5.1 Esercizio 1

1. In un cristallo *fcc* i vettori di base del reticolo reciproco sono:

$$\begin{cases} \vec{g}_1 = \frac{4\pi}{a} \left( -\frac{\hat{x}}{2} + \frac{\hat{y}}{2} + \frac{\hat{z}}{2} \right) \\ \vec{g}_2 = \frac{4\pi}{a} \left( +\frac{\hat{x}}{2} - \frac{\hat{y}}{2} + \frac{\hat{z}}{2} \right) \\ \vec{g}_3 = \frac{4\pi}{a} \left( +\frac{\hat{x}}{2} + \frac{\hat{y}}{2} - \frac{\hat{z}}{2} \right) \end{cases}$$

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. Dato che

$$\begin{aligned} \vec{G} &= h\vec{g}_1 + k\vec{g}_2 + l\vec{g}_3 = \\ &= \frac{2\pi}{a} [(-h + k + l)\hat{x} + (+h - k + l)\hat{y} + (+h + k - l)\hat{z}], \end{aligned}$$

otteniamo

$$\begin{aligned} \vec{G} \cdot \vec{d}_1 &= 0, \\ \vec{G} \cdot \vec{d}_2 &= \frac{\pi}{2}(h + k + l), \\ \vec{G} \cdot \vec{d}_3 &= -\frac{\pi}{2}(h + k + l). \end{aligned}$$

Infine,

$$\begin{aligned} F(\vec{G}) &= \left[ f_A + f_B e^{-i\frac{\pi}{2}(h+k+l)} + f_B e^{i\frac{\pi}{2}(h+k+l)} \right] = \\ &= N \left\{ f_A + 2f_B \cos \left[ \frac{\pi}{2}(h + k + l) \right] \right\} = \\ &= f_A N \left\{ 1 + \cos \left[ \frac{\pi}{2}(h + k + l) \right] \right\}. \end{aligned}$$

Di conseguenza

$$F(\vec{G}) = \begin{cases} 2Nf_A, & \text{se } \frac{\pi}{2}(h + k + l) = 2n\pi \rightarrow h + k + l = 4n, \\ Nf_A, & \text{se } \frac{\pi}{2}(h + k + l) = \frac{\pi}{2} + n\pi \rightarrow h + k + l = 2n + 1, \\ 0, & \text{se } \frac{\pi}{2}(h + k + l) = \pi + 2n\pi \rightarrow h + k + l = 2(2n + 1). \end{cases}$$

Come si può vedere, alcune delle riflessioni non sono permesse.

2. Ai piani  $\{1, 1, 1\}$  è associato il vettore  $\vec{G}_{(1,1,1)}$ . Dalle regole appena trovate per il fattore di struttura si vede che tale riflessione è permessa e l'intensità del picco associato è

$$I_{(1,1,1)} \propto |F(\vec{G}_{(1,1,1)})|^2 = (Nf_A)^2.$$

Analogamente, per i piani della famiglia  $\{3, 1, 1\}$  si ha

$$I_{(3,1,1)} \propto |F(\vec{G}_{(3,1,1)})|^2 = (Nf_A)^2.$$

Il rapporto delle intensità risulta quindi essere

$$\frac{I_{(1,1,1)}}{I_{(3,1,1)}} = 1.$$

3. Al secondo picco è associato il vettore  $\vec{G}_3$ . Infatti  $\vec{G}_2$  è associato alla riflessione dei piani della famiglia  $\{1, 1, 0\}$ , ma tale riflessione non è permessa per le regole trovare al punto 1.

Si ha dunque

$$\vec{G}_3 = \vec{g}_1 + \vec{g}_2 + 2\vec{g}_3 = \frac{4\pi}{a}(1, 1, 0),$$

Il cui modulo vale

$$|\vec{G}_3| = \frac{4\pi}{a}\sqrt{2}.$$

Invertendo la formula per la condizione di interferenza costruttiva

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

si ottiene  $\lambda = 1.5 \text{ \AA}$

## 5.2 Esercizio 2

1. Per ricavare la relazione di dispersione scriviamo le equazioni del moto in approssimazione armonica e per interazione a primi vicini per i due atomi:

$$M_A \ddot{u}_n = -C(2u_n - v_n - v_{n-1}) \quad (1)$$

$$M_B \ddot{v}_n = -C(2v_n - u_n - u_{n+1}) \quad (2)$$

dove C è la costa di forza tra due atomi. Le soluzioni sono onda piane della forma:

$$u_n = A_1 \exp i(qna - \omega t) \quad (3)$$

$$v_n = A_2 \exp i(q(na + d) - \omega t) \quad (4)$$

dove a è la distanza tra due atomi uguali e d tra due atomi di tipo diverso. Sostituendo (3) nell'equazione (1) e (4) nell'equazione (2) e imponendo uguale a zero il determinante dei coefficienti di  $A_1$  e  $A_2$  troviamo la relazione di dispersione:

$$\omega^2(q) = \frac{C(M_A + M_B)}{M_A M_B} \pm \frac{C}{M_A M_B} \sqrt{M_A^2 + M_B^2 + 2M_A M_B \cos(qa)} \quad (5)$$

a centro zona si ha

$$\omega_-(q)|_{q=0} = \omega_{AC}(q)|_{q=0} = 0 \quad (6)$$

$$\omega_+(q)|_{q=0} = \omega_{OT}(q)|_{q=0} = \sqrt{2C \frac{M_A + M_B}{M_A M_B}} = 12.1 \cdot 10^{12} \text{rad/s} \quad (7)$$

a bordo zona si ha

$$\omega_{OT}(q)|_{q=\pm \frac{\pi}{a}} = \sqrt{\frac{2C}{M_A}} = 9.8 \cdot 10^{12} \text{rad/s} \quad (8)$$

$$\omega_{AC}(q)|_{q=\pm \frac{\pi}{a}} = \sqrt{\frac{2C}{M_B}} = 7.2 \cdot 10^{12} \text{rad/s} \quad (9)$$

2. Possiamo ricavare la  $\theta_D$  dalle relazioni:

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

e

$$\omega_D = v_s q_D,$$

dove  $q_D$  può essere ottenuto dalla approssimazione di Debye che eguaglia il volume della prima zona di brillouin a quello di una sfera di raggio  $q_D$ . In una dimensione:

$$2q_D = \frac{2\pi}{a} \longrightarrow q_D = \frac{\pi}{a}.$$

La velocità del suono si ottiene dall'andamento lineare della branca acustica a piccoli valori di  $q$ :

$$\omega_{AC}(q \sim 0) \approx \sqrt{\frac{C}{2(M_A + M_B)}} q a = v_s q \quad \longrightarrow \quad v_s = \sqrt{\frac{C}{2(M_A + M_B)}} a \quad (10)$$

dove la costante reticolare  $a$  si può calcolare tramite la densità lineare di massa  $\rho$

$$\rho = \frac{M_A + M_B}{a} \quad \longrightarrow \quad a = \frac{M_A + M_B}{\rho} = 2.6 \text{ \AA}$$

e, di conseguenza,  $v_s = 853 \text{ m/s}$ .

Si ottiene quindi

$$\theta_D = \frac{\hbar \omega_D}{K_B} = \frac{\hbar v_s q_D}{K_B} = \frac{\hbar v_s \pi}{K_B a} = 79 \text{ K}$$

3. Sono presenti 3 branche acustiche e 3 branche ottiche, a  $T = 800 \text{ K}$  si è in regime di alte temperature, quindi entrambe le branche contribuiscono alla capacità termica data dalla legge di Dulong-Petit, per un totale di 6N modi:

$$\frac{C_V(T_2)}{M} = 6 \frac{N}{M} K_B = 0.94 \text{ J K}^{-1} \text{ g}^{-1}.$$

### 5.3 Esercizio 3

1. Le due bande sono:

$$E_A(k) = \beta_A - 2\gamma_A \cos(ka) = 1 - 6 \cos(ka) \quad (\text{eV})$$

$$E_B(k) = \beta_B + 2\gamma_B \cos(ka) = -4 + 2 \cos(ka) \quad (\text{eV})$$

Per la banda A: il minimo vale  $\beta_A - 2\gamma_A = -5 \text{ eV}$  e il massimo  $\beta_A + 2\gamma_A = 7 \text{ eV}$ . Per la banda B: il minimo vale  $\beta_B - 2\gamma_B = -6 \text{ eV}$  e il massimo  $\beta_B + 2\gamma_B = -2 \text{ eV}$ . Le bande risultano quindi sovrapposte.

2. Nel caso di catena bivalente, entrambe le bande saranno parzialmente piene. Per calcolare l'energia di Fermi procediamo col conteggio degli stati occupati che dovranno uguagliare il numero di elettroni del sistema ( $2N$ ), gli elettroni in banda A occuperanno stati con quasimomento nell'intervallo  $(-k_1; +k_1)$ , quelli in banda B negli intervalli  $(-\frac{\pi}{a}, -k_2)$  e  $(k_2; \frac{\pi}{a})$ :

$$2N = \frac{2}{2\pi} [2k_1 + 2(\frac{\pi}{a} - k_2)] \quad (11)$$

Sostituendo  $L = Na$ , si trova che  $k_2 = k_1$ . Poichè l'energia di Fermi del sistema è unica, deve essere  $E_F = E_A(k_1) = E_B(k_1)$ , ed è pertanto quel valore per il quale le bande si incrociano:

$$1 - 6 \cos(k_1 a) = -4 + 2 \cos(k_1 a) \quad \rightarrow \quad \cos(k_1 a) = -5/8 \quad (12)$$

da cui:

$$k_1 = \frac{\arccos(5/8)}{a} \sim \frac{0.89}{a} \quad (13)$$

$$E_F = -2.75 \text{ eV} \quad (14)$$

3. Gli stati occupati sono dunque in banda A nell'intervallo  $(-\frac{0.89}{a}; +\frac{0.89}{a})$  e in banda B negli intervalli  $(-\frac{\pi}{a}, -\frac{0.89}{a})$  e  $(\frac{0.89}{a}; \frac{\pi}{a})$ .

Il comportamento della catena è metallico a causa della struttura a bande sovrapposte.

#### 5.4 Esercizio 4

1. Se grafichiamo i dati in tabella in funzione di  $1000/T$  e in scala logaritmica si osserva una prima pendenza del grafico che corrisponde al regime ad alte temperature, in tale regime il semiconduttore drogato si comporta come un intrinseco, confermato dalla coincidenza dei valori misurati per i portatori intrinseci a tali temperature. La pendenza è proporzionale all'energia della gap. Il valore dei portatori maggioritari tra  $T = 500$  K e  $T = 1000$  K è costante, questo segna il passaggio al regime di temperature intermedie in cui la concentrazione di elettroni  $n$  non varia con la temperatura ed è pari al drogaggio. A temperature  $T = 200$  K inizia la seconda pendenza del grafico, proporzionale all'energia di ionizzazione dei donori, in tale zona il semiconduttore lavora in regime di basse temperature.

L'energia della gap si trova dalla pendenza della prima parte del grafico (regime ad alte temperature), considerando  $n(T) \approx T^{3/2} \exp\left[-\frac{E_g}{2k_B T}\right]$ . Valutando in due punti che appartengono al regime intrinseco ( $T=500$ K e  $T=1000$ K), possiamo estrarre il valore di  $E_g$ :

$$\ln[(2 \cdot 10^{12}/2 \cdot 10^{10}) \cdot (500/1000)^{3/2}] = -\frac{E_g}{2k_b} \cdot 10^{-3} (1-2)K^{-1}$$

da cui risulta  $E_g = 0.61$  eV. Il drogaggio è pari al valore del plateau nel grafico, corrispondente al regime di temperature intermedie:  $N_D = 2 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-3}$ .

2. Per la legge della massa d'azione si ha che:  $p(400) = \frac{n_i^2(400)}{n(400)}$ . I valori sono riportati in tabella, per cui si ha:  $p(400) = \frac{4 \cdot 10^{18}}{2 \cdot 10^{10}} \text{ cm}^{-3} = 2 \cdot 10^8 \text{ cm}^{-3} \ll n(400)$ .
3. A  $T = 400$  K la conducibilità sarà dovuta principalmente ai maggioritari, poiché  $p(400) \ll n(400)$ . Di conseguenza si ha

$$\sigma = n e \mu = \frac{n e^2 \tau}{m_e^*} = 6.63 \cdot 10^{-4} \Omega^{-1} \text{ m}^{-1}$$