

Fisica della Materia Condensata.
Prof. Paola Gallo.
Prova del IV appello di esame 6 Luglio 2023

1 Esercizio 1

Un solido monoatomico che cristallizza in una struttura cubica a facce centrate con lato del cubo $a = 2.5 \text{ \AA}$ viene irraggiato da un fascio di raggi X monocromatici di lunghezza d'onda $\lambda = 2 \text{ \AA}$.

1. Determinare l'angolo al quale si osservano il terzo e il quarto picco di Bragg. (2.5 punti)
2. Se la temperatura di Debye del solido vale $T_D = 250K$, determinare la velocità del suono. (2.5 punti)
3. Determinare il valore del calore specifico a $T_1 = 10 \text{ K}$ e a $T_2 = 1000 \text{ K}$. (2.5 punti)
4. Come cambierebbe il valore del calore specifico a T_2 nel caso il cristallo fosse biatomico? (2.5 punto)

2 Esercizio 2

Sia data una catena monoatomica lineare disposta lungo l'asse $\hat{x}$ di passo reticolare $a = 1.3 \text{ \AA}$. Su ogni nodo è disposto un atomo bivalente.

1. Scrivere la forma esplicita delle bande $E_s(\vec{k})$ e $E_{p_x}(\vec{k})$ risultanti dall'approssimazione a tight binding a primi vicini da funzioni di tipo s e p_x . Si trascurino le interazioni $s - p_x$. Siano $E_{0,s} = 1.5 \text{ eV}$, $E_{0,p_x} = 4 \text{ eV}$, $|\gamma_s| = 0.25 \text{ eV}$, $|\gamma_{p_x}| = 0.5 \text{ eV}$. (2.5 punti)
2. Disegnare le bande di energia. Quanto vale l'energia di gap a bordo e centro zona? (2.5 punti)
3. Il materiale si comporta come isolante o come conduttore? Quanto vale l'energia di Fermi? (2.5 punti)
4. Calcolare la massa efficace degli elettroni della banda s a centro e a bordo zona. (2.5 punto)

3 Esercizio 3

Si abbia un semiconduttore drogato la cui costante di Hall vale $R_H = 2 \text{ C}^{-1} \text{ m}^3$ nella regione di temperature tra $T_1 = 250 \text{ K}$ e $T_2 = 400 \text{ K}$. In tale regione il semiconduttore si trova in regime di saturazione.

1. Determinare se il semiconduttore è drogato di tipo p o di tipo n e la concentrazione di atomi donori o accettori. (3.5 punti)
2. 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 $2 \times 10^{22} \text{ m}^{-3}$. (3.5 punti)
3. Determinare la densità di portatori minoritari a $T_3 = 300 \text{ K}$. (3 punti)

$1 \text{ u.m.a.} = 1.66 \cdot 10^{-27} \text{ Kg}$, $e = 1.6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$, $m_e = 9.1 \cdot 10^{-31} \text{ Kg}$, $K_B = 1.38 \cdot 10^{-23} \text{ J/K} = 8.62 \cdot 10^{-5} \text{ eV/K}$, $\hbar = 1.054 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s} = 6.58 \cdot 10^{-16} \text{ eV} \cdot \text{s}$

4 Soluzioni

4.1 Esercizio 1

1. Il reticolo *fcc* ha reticolo reciproco di simmetria *bcc*. Dato che per un tale cristallo tutti i picchi di diffrazione sono visibili, il terzo e il quarto picco di diffrazione sono associati al terzo e quarto più piccolo dei vettori del reticolo reciproco, che sono di modulo

$$G_3 = \frac{4\pi}{a}\sqrt{2}, G_4 = \frac{2\pi}{a}\sqrt{11}$$

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

$$G = 2k \sin(\theta/2) = \frac{4\pi}{\lambda} \sin(\theta/2)$$

da cui si ricava

$$\theta_3 = 45, \theta_4 = 70.$$

2. La velocità del suono, supponendo che le tre branche siano degeneri, si può ricavare dalla relazione

$$K_B T_D = \hbar v_s k_D$$

dove il vettore d'onda di Debye si può ricavare, in tre dimensioni, da

$$k_D = \sqrt[3]{6\pi^2 n} = \frac{\sqrt[3]{24\pi^2}}{a} = \frac{2\sqrt[3]{3\pi^2}}{a} = 2 \cdot 10^{10} \text{ m}^{-1}$$

avendo usato il fatto che per un reticolo *fcc* vale $n = \frac{4}{a^3}$.

Si ha quindi che

$$v_s = \frac{K_B T_D}{\hbar k_D} = \frac{1.38 \cdot 10^{-23} \text{ J/K} \cdot 250 \text{ K}}{1.054 \cdot 10^{-34} \text{ J s} \cdot 2 \cdot 10^{10} \text{ m}^{-1}} = 1600 \text{ m/s}.$$

3. A $T_1 \ll T_D$ ci si trova in regime di basse temperature e si può sfruttare quindi la relazione

$$c_V(T) = \frac{C_V(T)}{V} = \frac{12}{5} \pi^4 \frac{4}{a^3} K_B \left(\frac{T}{T_D} \right)^3$$

ottenendo

$$c_V(T_1) = 3 \cdot 10^4 \text{ J/Km}^3.$$

A $T_2 \gg T_D$ ci si trova in regime di alte temperature, per cui si utilizza l'approssimazione di Dulong-Petit per i $3N$ modi acustici

$$c_V(T) = 3n K_B$$

e quindi

$$c_V(T_2) = 6 \cdot 10^6 \text{ J/Km}^3.$$

4. Nel caso in cui il cristallo fosse biatomico si avrebbero anche i modi ottici. Supponendo di essere ancora in regime di alte temperature ($T_2 \gg T_E$), si ha che anche i modi ottici contribuiscono al calore specifico con un fattore $3N$. Di conseguenza

$$c_V(T) = 3nK_B + 3nK_B$$

e quindi

$$c_V(T_2) = 1 \cdot 10^7 \text{ J/Km}^3.$$

4.2 Esercizio 2

1. Dato che l'interazione è limitata a primi vicini e che tali atomi si trovano nelle posizioni $R = \pm a$, si ha che

$$\begin{aligned} E_s(\vec{k}) &= E_{0,s} - \sum_{\vec{R}} \gamma_s e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}} = \\ &= E_{0,s} - \gamma_s (e^{-ik_x a} + e^{ik_x a}) = E_{0,s} - 2\gamma_s \cos(k_x a). \end{aligned}$$

Procedendo in maniera analoga per la banda associata agli orbitali p_x , si ottiene

$$E_{p_x} = E_{0,p_x} - 2\gamma_{p_x} \cos(k_x a)$$

La sovrapposizione tra orbitali s è positiva mentre quella tra orbitali p_x è negativa, di conseguenza $\gamma_s > 0$ e $\gamma_{p_x} < 0$. Alla fine le bande di energia avranno la forma

$$\begin{aligned} E_s(\vec{k}) &= E_{0,s} - 2|\gamma_s| \cos(ka), \\ E_{p_x}(\vec{k}) &= E_{0,p_x} + 2|\gamma_{p_x}| \cos(ka). \end{aligned}$$

2. Dal disegno delle bande di energia risulta evidente come il minimo della banda s sia a centro zona e il massimo a bordo zona, mentre per la banda p_x si ha il massimo a centro zona e il minimo a bordo zona. In particolare a centro zona ($k = 0$) si hanno $E_s^{MIN} = 1 \text{ eV}$ e $E_{p_x}^{MAX} = 5 \text{ eV}$, mentre a bordo zona ($k = \pm\pi/a$) si hanno $E_s^{MAX} = 2 \text{ eV}$ e $E_{p_x}^{MIN} = 4 \text{ eV}$. A centro zona la distanza tra le due bande risulta essere $E_{p_x}^{MAX} - E_s^{MIN} = 4.0 \text{ eV}$, mentre a bordo zona $E_{p_x}^{MIN} - E_s^{MAX} = 1 \text{ eV}$.
3. Essendo il cristallo composto da atomi bivalenti e la banda s quella a energia più bassa, si ha che tale banda risulta completamente occupata. Il materiale si comporta quindi come un isolante. Dato che gli elettroni riempiono tutta la banda s fino al suo massimo, si ha che l'energia di Fermi corrisponde al valore che l'energia di tale banda assume a bordo zona

$$E_F = E_s\left(\frac{\pi}{a}\right) = 2 \text{ eV}.$$

4. La massa efficace degli elettroni è data da

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

Per la banda s si ha

$$m_s^*(k) = \frac{\hbar^2}{2 a^2 |\gamma_s| \cos(k a)},$$

da cui i valori richiesti

$$m_s^*(0) = \frac{\hbar^2}{2 a^2 |\gamma_s|} = 5 \times 10^{-30} \text{ Kg},$$

$$m_s^*(\pi/a) = -\frac{\hbar^2}{2 a^2 |\gamma_s|} = -5 \times 10^{-30} \text{ Kg}.$$

4.3 Esercizio 3

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 si ottiene

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

2. A T_2 si 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

$$E_g = -2 K_B T_2 \ln \left(\frac{N_A}{N_V(T_2)} \right) = 0.5 \text{ eV}.$$

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

$$N_V(T_3) = N_V(T_2) \left(\frac{T_3}{T_2} \right)^{3/2} = 1 \times 10^{22} \text{ m}^{-3}.$$

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

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