

Fisica della Materia Condensata.
Prof. Paola Gallo.
Prova del IV appello di esame 1 Luglio 2022

1 Esercizio 1

Un solido monoatomico che cristallizza in una struttura cubica a facce centrate con lato del cubo $a = 3 \text{ \AA}$ 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 $T_1 = 10K$ e a $T_2 = 1000K$. (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

Una catena monoatomica lineare disposta lungo l'asse \hat{y} ha passo reticolare $a = 2.5 \text{ \AA}$, ed è formata da atomi bivalenti.

1. Scrivere la forma esplicita delle bande $E_s(\vec{k})$ e $E_{p_x}(\vec{k})$ in approssimazione tight binding per interazione a primi vicini da funzioni di tipo s e p_x , discutendo il segno degli integrali di sovrapposizione γ . Siano $E_{0,s} = 1.2 \text{ eV}$, $E_{0,p_x} = 2.3 \text{ eV}$, $|\gamma_s| = 0.2 \text{ eV}$, $|\gamma_{p_x}| = 0.7 \text{ eV}$. (2.5 punti)
2. Disegnare le bande di energia. Determinare il valore dell'energia di gap a bordo e centro zona. (2.5 punti)
3. Determinare il k di Fermi, l'energia di Fermi e se il materiale si comporta come isolante o come conduttore. Descrivere come questi cambiano se gli atomi sono monovalenti. (2.5 punti)

4. Calcolare la massa efficace degli elettroni della banda s a centro zona. (2.5 punti)

3 Esercizio 3

In un semiconduttore intrinseco la gap di energia vale $E_G = 1$ eV e il potenziale chimico si trova sempre a metà della gap proibita.

1. Se la densità di portatori intrinseci a $T = 270K$ vale $n_i(270K) = 10^{12}$ cm^{-3} , determinare il numero di elettroni in banda di conduzione a $T = 350K$ e la massa dei portatori di carica. (3 punti)
2. Il semiconduttore viene drogato con densità di donatori $N_d = 10^{14}$ cm^{-3} e posto alla temperatura $T_1 = 30K$. Sapendo che la loro energia di ionizzazione è di $\epsilon_d = 10$ meV, determinare in quale regime si trova il semiconduttore e calcolare il numero di elettroni in banda di conduzione $n(T)$. (4 punti)
3. Si determini in quale regime si trova il semiconduttore alla temperature di $T_2 = 750K$ e si determini la conducibilità in tale regime. (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 quarto picco di diffrazione sono associati al terzo e quarto vettore di reticolo reciproco più piccoli, che sono di modulo

$$G_3 = \sqrt{2} \frac{4\pi}{a}.$$

$$G_4 = \sqrt{11} \frac{2\pi}{a}.$$

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

$$G_3 = 2k \sin(\theta_3/2) = \frac{4\pi}{\lambda} \sin(\theta_3/2)$$

da cui si ricava

$$\theta_3 = 53, \theta_4 = 59.$$

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

$$v_s = \frac{K_B T_D}{\hbar k_D} = \frac{1.38 \cdot 10^{-23} \text{ J/K} \cdot 250 \text{ K}}{1.054 \cdot 10^{-34} \text{ J s} \cdot 2 \cdot 10^{10} \text{ m}^{-1}} = 1500 \text{ m/s}.$$

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

$$c_V(T_1) = 2.95 \cdot 10^4 \text{ J/Km}^3.$$

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

$$c_V(T_2) = 5.7 \cdot 10^6 \text{ J/Km}^3.$$

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

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

e quindi

$$c_V(T_2) = 1.35 \cdot 10^7 \text{ J/Km}^3.$$

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

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

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

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

Poichè la catena è disposta lungo l'asse y gli integrali di sovrapposizione tra orbitali s e quella tra orbitali p_x sono entrambi positivi, di conseguenza $\gamma_s > 0$ e $\gamma_{p_x} > 0$. Dunque le bande di energia avranno la forma

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

2. I minimi e i massimi sulle due bande sono allo stesso k . In particolare a centro zona ($k = 0$) si hanno i minimi $E_s^{MIN} = 0.78 \text{ eV}$ e $E_{p_x}^{MIN} = 1.1 \text{ eV}$, mentre a bordo zona ($k = \pm\pi/a$) si hanno i massimi $E_s^{MAX} = 1.3 \text{ eV}$ e $E_{p_x}^{MAX} = 2.8 \text{ eV}$. A centro zona la distanza tra le due bande risulta essere $E_{p_x}^{MIN} - E_s^{MIN} = 0.25 \text{ eV}$, mentre a bordo zona $E_{p_x}^{MAX} - E_s^{MAX} = 2 \text{ eV}$.
3. Essendo il cristallo composto da atomi bivalenti e poiche le due bande non si sovrappongono tra 1 eV e 1.2 eV di energia, sia la banda s , che quella p risulteranno parzialmente occupate. Il materiale si comporta quindi come un conduttore. Indichiamo con k_1 il vettore d'onda per il quale $E_{p_x}(k_1) = E_F$ e con k_2 quello per cui $E_s(k_2) = E_F$ e imponiamo le condizioni:

$$E_s(k_1) = E_p(k_2) = E_F$$

$$2 \cdot \frac{2k_1 + 2k_2}{\frac{2\pi}{Na}} = 2N \longrightarrow k_1 = \frac{\pi}{a} - k_2.$$

pertanto, dalla prima condizione abbiamo:

$$1 - 0.2\cos(k_2a) = 2 - 1\cos(k_1a) = 2 - 1\cos(\pi - k_2a) = 2 + 1\cos(k_2a)$$

da cui si ottiene $k_2 = 0.9\frac{\pi}{a}$ e $k_1 = 0.25\frac{\pi}{a}$. Quindi possiamo calcolarci l'energia di Fermi del sistema:

$$E_s(k_2) = E_F = 1 - 0.2\cos(k_2a) = 1.3eV.$$

La banda s sarà occupata per $-k_2 < k < k_2$ e la banda p per $-k_1 < k < k_1$. Se il cristallo fosse composto da atomi monovalenti, la banda s sarebbe semipiena, occupata fino al k di Fermi $k_F = \frac{\pi}{2a}$, con energia di Fermi $E_F = E_s(k_F) = 1eV$, che si trova sotto la banda p che di conseguenza sarebbe vuota. Il cristallo avrebbe comportamento metallico.

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

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

da cui il valore della massa efficace a centro zona:

$$m_s^*(0) = \frac{\hbar^2}{2a^2|\gamma_s|} = 7.5 \times 10^{-30} \text{ Kg.}$$

4.3 Esercizio 3

1. In un semiconduttore intrinseco le concentrazioni di elettroni in banda di conduzione equivale al numero di lacune lasciate in banda di valenza: $n(T) = p(T) = n_i(T)$, dove $n_i(T)$ è il numero di portatori intrinseci dati dalla legge:

$$n_i(T) = \frac{1}{4} \left(\frac{2K_B T}{\pi \hbar^2} \right)^{3/2} (m_e^* m_p^*)^{3/4} \exp \left[-\frac{E_G}{2K_B T} \right] \quad (1)$$

Conoscendo la concentrazione di portatori intrinseci ad una temperatura e il valore della gap di energia ci ricaviamo la concentrazione ad un'altra temperatura:

$$\frac{n_i(T_1)}{n_i(T_2)} = \left(\frac{T_1}{T_2}\right)^{3/2} \exp\left[-\frac{E_G}{2K_B}\left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2}\right)\right].$$

Da cui si ricava:

$$n_i(T = 350K) = n_i(T = 270K) \left(\frac{350K}{270K}\right)^{3/2} \exp\left[-\frac{E_G}{2K_B}\left(\frac{1}{350K} - \frac{1}{270K}\right)\right],$$

da cui otteniamo: $n_i(350K) = 5.05 \cdot 10^{14} cm^{-3}$.

Sfruttando il fatto che in un conduttore intrinseco il potenziale chimico è dato dalla legge:

$$\mu(T) = E_V + \frac{E_G(T)}{2} - \frac{3}{4}K_B T \ln\left(\frac{m_e^*}{m_p^*}\right)$$

e che il potenziale chimico si trova sempre a metà della gap, si ha che le masse efficaci dei due tipi di portatori sono uguali: $m_e^* = m_p^* = m^*$. La massa efficace m^* si ricava invertendo la (1) e utilizzando $n_i(T_2 = 270K)$:

$$m^* = \left[4n_i(T_2) \left(\frac{2K_B T_2}{\pi \hbar^2}\right)^{-3/2} \exp\left(\frac{E_G}{2K_B T_2}\right)\right]^{2/3} = 3.9 \cdot 10^{-31} \text{ Kg.}$$

2. All'energia di ionizzazione possiamo associare una temperatura di ionizzazione: $K_B T_d = \epsilon_d$:

$$T_d = 115K.$$

Possiamo vedere che a $T_1 = 30K$ siamo a temperature basse per cui il semiconduttore ha comportamento estrinseco. In questo regime il numero di elettroni liberi vale:

$$n(T) = \sqrt{N_C N_d / 2} \exp\left[-\frac{\epsilon_d}{2K_B T}\right].$$

dove

$$N_C(T) = \frac{1}{4} \left(\frac{2m^* K_B T}{\pi \hbar^2}\right)^{3/2} = 4.7 \cdot 10^{15} cm^{-3},$$

da cui si ricava $n(30K) = 1.9 \cdot 10^{13} cm^{-3}$.

3. Utilizzando equazione 1 ricaviamo $n_i(750K) = 4.3 \cdot 10^{16} cm^{-3}$ molto maggiore della concentrazione di donori, quindi siamo in regime intrinseco, in tale regime la conducibilità può essere scritta:

$\sigma(750K) = n_i(750K) \cdot e \cdot (\mu_e + \mu_p)$, dove μ sono le mobilità dei portatori di carica.