

Scritto Appello I, Materia Condensata. AA 2017/2018 (5/02/2018)

Coloro che hanno superato il primo esonero dovranno svolgere gli esercizi 3 e 4 in un tempo massimo di due ore (il punteggio sarà riportato in trentesimi). Coloro che non hanno superato il primo esonero dovranno svolgere tutti e quattro gli esercizi in un tempo massimo di quattro ore oppure gli esercizi 1 e 2 e/o 3 e 4, ciascuna coppia in due ore.

1 Esercizio 1

Un cristallo AB_2 che ha struttura fcc viene studiato con il metodo delle polveri ($\lambda = 1.5 \text{ \AA}$). I tre atomi sono individuati dai vettori di base $\vec{d}_A = \vec{0}$, $\vec{d}_{B_1} = \frac{a}{4}(1, 1, 1)$ e $\vec{d}_{B_2} = -\frac{a}{4}(1, 1, 1)$. Sia il fattore di forma dell'atomo A il doppio di quello dell'atomo B ($f_A = 2f_B$).

1. Studiare il fattore di struttura del cristallo. Quali riflessioni sono permesse? (3 punti)
2. Determinare il rapporto tra le intensità dei picchi associati alle famiglie di piani $\{1, 1, 1\}$ e $\{1, 1, 2\}$. (2 punti)
3. Il secondo picco si trova in corrispondenza dell'angolo $\theta^{(2)} = 40^\circ$. Determinare il valore del parametro reticolare a . (2.5 punti)

2 Esercizio 2

Un solido isotropo di densità $\rho = 3 \text{ g/cm}^3$ cristallizza in un reticolo cubico semplice di lato a . La base è biatomica ed è costituita da un atomo di massa $M_1 = 4 \text{ u.m.a.}$ e da un atomo di massa $M_2 = 10 \text{ u.m.a.}$ che si alternano a distanza $a/2$ l'uno con l'altro lungo i lati del cubo. Una misura della velocità del suono fornisce il valore $v_s = 1.42 \cdot 10^5 \text{ cm/s}$.

1. Trovare la frequenza dei modi ottici a centro zona. (3 punti)
2. Calcolare la capacità termica del solido per unità di massa a $T = 10 \text{ K}$, specificando quali modi contribuiscono a questa temperatura. (2.5 punti)
3. Calcolare la capacità termica del solido per unità di massa nel limite di alte temperature, specificando quali modi contribuiscono a questa temperatura. (2 punti)

3 Esercizio 3

Sia dato un cristallo monoatomico e monovalente con reticolo tetragonale e parametri reticolari $a = 0.2 \text{ nm}$ (per la base) e $b = 0.25 \text{ nm}$. Ad ogni elettrone è associato un orbitale di tipo p_z . Noti i valori $|\gamma_{p_z,1}| = 0.15 \text{ eV}$, $|\gamma_{p_z,2}| = 0.10 \text{ eV}$ e $E_{0,p_z} = 3.0 \text{ eV}$.

1. Associare i valori dei due integrali di trasferimento alle tre direzioni topologiche e giustificare brevemente la scelta fatta. Si ricorda che tale integrale è definito come

$$\gamma(\vec{R}) = - \int \phi^*(\vec{r}) \Delta V(\vec{r}) \phi(\vec{r} - \vec{R}) d\vec{r}$$

(1 punto)

2. Scrivere la forma esplicita della banda $E_{p_z}(\vec{k})$ in approssimazione di tight binding con interazione a secondi vicini. (3 punti)
3. Disegnare l'andamento della banda di energia nelle direzioni $(1, 0, 0)$, $(0, 1, 0)$ e $(0, 0, 1)$. Quanto vale la larghezza di banda? (1.5 punti)
4. Trovare le componenti del tensore di massa e calcolarne il valore a centro zona. (2 punti)

4 Esercizio 4

Sia dato un semiconduttore intrinseco. Sono note le concentrazioni di portatori intrinseci a $T_1 = 500 \text{ K}$, $n_i(T_1) = 9.71 \cdot 10^{21} \text{ m}^{-3}$, e a $T_2 = 300 \text{ K}$, $n_i(T_2) = 2.91 \cdot 10^{18} \text{ m}^{-3}$, e la conducibilità elettrica a T_2 , $\sigma(T_2) = 2 \cdot 10^{-3} \Omega^{-1} \text{ m}^{-1}$. Non si osserva effetto Hall. Il potenziale chimico si trova sempre a metà della gap.

1. Quanto vale l'energia di gap E_g ? (2.5 punti)
2. Quanto valgono le mobilità? (2 punti)
3. Quanto valgono i tempi medi di scattering? (1 punto)
4. Nel caso il semiconduttore sia drogato con impurezze di tipo n con concentrazione $N_D = 6.5 \cdot 10^{22} \text{ m}^{-3}$, verificare la condizione di non degenerazione a T_2 . Si supponga che T_2 sia in regime di saturazione. Si usi N_C costante uguale a $N_C = 1.6 \cdot 10^{30} \text{ m}^{-3}$. (2 punti)

$1 \text{ u.m.a.} = 1.66 \cdot 10^{-27} \text{ Kg}$, $e = 1.6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$, $m_e = 9.1 \cdot 10^{-31} \text{ Kg}$, $K_B = 1.38 \cdot 10^{-23} \text{ J/K} = 8.62 \cdot 10^{-5} \text{ eV/K}$, $\hbar = 1.054 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s} = 6.58 \cdot 10^{-16} \text{ eV} \cdot \text{s}$, $1 \text{ eV} = 11605 \text{ K} = 1.602 \cdot 10^{-19} \text{ J}$.

5 Soluzioni

5.1 Esercizio 1

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

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

1. 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 $\{2, 1, 1\}$ si ha

$$I_{(2,1,1)} \propto |F(\vec{G}_{(2,1,1)})|^2 = (2Nf_A)^2 = 4(Nf_A)^2.$$

Il rapporto delle intensità risulta quindi essere

$$\frac{I_{(1,1,1)}}{I_{(2,1,1)}} = \frac{1}{4}.$$

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 trovate 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

$$a = \frac{\lambda\sqrt{2}}{\sin\left(\frac{\theta^{(2)}}{2}\right)} = 6.2 \text{ \AA}.$$

5.2 Esercizio 2

1. La frequenza dei modi ottici a centro zona è

$$\omega_O = \sqrt{2C \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)} \quad (1)$$

La costante di forza C si ricava invertendo la formula per la velocità del suono

$$v_s = a \sqrt{\frac{C}{2(M_1 + M_2)}}$$

dove il valore della costante reticolare a si ricava dalla densità

$$\rho = \frac{M_1 + M_2}{a^3} \rightarrow a = \left(\frac{M_1 + M_2}{\rho} \right)^{1/3} = 1.98 \cdot 10^{-8} \text{ cm} = 1.98 \text{ \AA}.$$

Si ottiene

$$C = 2(M_1 + M_2) \left(\frac{v_s}{a} \right)^2 = 2.39 \cdot 10^3 \text{ dyne/cm}^2$$

e quindi, usando la (1), si ottiene $\omega_O = 3.2 \cdot 10^{13} \text{ rad/s}$.

2. Per stimare il contributo al calore specifico dovuto ai modi ottici ci serviamo dell'approssimazione di Einstein usando il valore della frequenza ottica a centro zona $\omega_E = \omega_O$

$$T_E = \frac{\hbar\omega_E}{K_B} = 244 \text{ K.}$$

Il contributo ottico per basse temperature va come

$$C_V^O \propto e^{-\frac{T_E}{T}}$$

Per quanto riguarda il contributo dovuto ai modi acustici, usiamo l'approssimazione di Debye. In tre dimensioni la frequenza di Debye è

$$\omega_D = v_s \left(\frac{6\pi^2 N}{V} \right)^{1/3}$$

e la temperatura di Debye T_D risulta essere

$$T_D = \frac{\hbar\omega_D}{K_B} = \frac{\hbar v_s}{a K_B} \sqrt[3]{6\pi^2} = 214 \text{ K.}$$

Il contributo acustico va come $(T/T_D)^3$. Alla temperatura data il contributo acustico è sette ordini di grandezza più grande rispetto a quello ottico, quindi trascuriamo quest'ultimo.

Dato che supponiamo i tre modi acustici degeneri, il calore specifico per unità di massa a $T = 10 \text{ K}$ sarà dato da

$$\begin{aligned} c_V^M(T) &= \frac{C_V(T)}{M} = \frac{12}{5} \pi^4 \frac{N}{M} K_B \left(\frac{T}{T_D} \right)^3 = \frac{12}{5} \pi^4 \frac{V}{a^3} \frac{a}{\rho V} K_B \left(\frac{T}{T_D} \right)^3 = \\ &= \frac{12}{5} \pi^4 \frac{1}{a^3 \rho} K_B \left(\frac{T}{T_D} \right)^3 \Big|_{10\text{K}} = 14.1 \frac{\text{J}}{\text{Kg K}}. \end{aligned}$$

3. Ad alte temperature possiamo usare l'approssimazione di Dulong-Petit. Il contributo al calore specifico deriva sia dai $3N$ modi acustici che dai $3N$ modi ottici. Si ha quindi

$$c_V^M(T) = \frac{6NK_B}{M} = \frac{6K_B}{\rho a^3} = 3.6 \cdot 10^3 \frac{\text{J}}{\text{Kg K}}.$$

5.3 Esercizio 3

1. Lungo l'asse \hat{z} la sovrapposizione degli orbitali è minore perché il parametro reticolare b è più grande di a . Di conseguenza si ha

$$\begin{aligned} |\gamma_{p_z,x}| &= |\gamma_{p_z,y}| = |\gamma_{p_z,1}|, \\ |\gamma_{p_z,z}| &= |\gamma_{p_z,2}|. \end{aligned}$$

2. Gli atomi si trovano nelle posizioni $\vec{R} = (\pm a, 0, 0), (0, \pm a, 0), (0, 0, \pm b)$, si ha quindi

$$\begin{aligned} E_{p_z}(\vec{k}) &= E_{0,p_z} - \sum_{\vec{R}} \gamma_i e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}} = \\ &= E_{0,p_z} - \gamma_{p_z,x} (e^{-ik_x a} + e^{ik_x a}) - \gamma_{p_z,y} (e^{-ik_y a} + e^{ik_y a}) - \gamma_{p_z,z} (e^{-ik_z b} + e^{ik_z b}) = \\ &= E_{0,p_z} - 2\gamma_{p_z,x} \cos(k_x a) - 2\gamma_{p_z,y} \cos(k_y a) - 2\gamma_{p_z,z} \cos(k_z b). \end{aligned}$$

I segni di $\gamma_{p_z,x}$ e $\gamma_{p_z,y}$ sono positivi, quello di $\gamma_{p_z,z}$ negativo, quindi

$$E_{p_z}(\vec{k}) = E_{0,p_z} - 2|\gamma_{p_z,x}| \cos(k_x a) - 2|\gamma_{p_z,y}| \cos(k_y a) + 2|\gamma_{p_z,z}| \cos(k_z b).$$

3. Dai grafici degli andamenti della banda nelle tre direzioni si vede facilmente che il massimo si ha in $(\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}, 0)$ e il minimo in $(0, 0, \frac{\pi}{b})$. Pertanto l'ampiezza di banda vale $E_{p_z}^{MAX} - E_{p_z}^{MIN} = 3.8 \text{ eV} - 2.2 \text{ eV} = 1.6 \text{ eV}$.
4. Le componenti del tensore di massa sono definite come

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

Dato che nella banda non compaiono termini misti in k_x, k_y e k_z , il tensore è diagonale. A centro zona $(0, 0, 0)$ si avrà dunque

$$\begin{aligned} m_{xx}^*(0, 0, 0) &= \hbar^2 \frac{1}{2|\gamma_{p_z,x}|a^2} = 5.78 \cdot 10^{-30} \text{ Kg}, \\ m_{yy}^*(0, 0, 0) &= \hbar^2 \frac{1}{2|\gamma_{p_z,y}|a^2} = 5.78 \cdot 10^{-30} \text{ Kg}, \\ m_{zz}^*(0, 0, 0) &= \hbar^2 \frac{1}{2|\gamma_{p_z,z}|b^2} = -5.55 \cdot 10^{-30} \text{ Kg}. \end{aligned}$$

5.4 Esercizio 4

In un semiconduttore intrinseco le concentrazioni di elettroni e lacune sono uguali: $n = p = n_i$.

Sfruttando il fatto che vale la relazione

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

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: $m_e^* = m_p^* = m^*$. Inoltre, dato che nel campione non si osserva effetto Hall, dalla relazione

$$R_H = \frac{1}{qn} \frac{\mu_p - \mu_n}{\mu_p + \mu_n}$$

si deduce che elettroni e lacune hanno la stessa mobilità: $\mu_e = \mu_p$.

1. Si sfrutta la relazione

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

che in questo caso diviene

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

Conoscendo la concentrazione dei portatori intrinseci a due temperature si può ricavare il valore dell'energia di gap.

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

Invertendo si ha

$$E_G = -\frac{2K_B}{\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2}} \ln \left[\frac{n_i(T_1)}{n_i(T_2)} \left(\frac{T_2}{T_1} \right)^{3/2} \right] = 0.95 \text{ eV}.$$

2. Per ricavare la mobilità usiamo l'informazione che abbiamo riguardo la conducibilità. Si ha

$$\sigma = ne\mu_e + pq\mu_p = 2en_i\mu$$

avendo sfruttato il fatto che le mobilità sono uguali tra di loro e che la concentrazione di portatori è quella intrinseca. Invertendo la formula si ottiene

$$\mu = \frac{\sigma(T_2)}{2en_i(T_2)} = 2.15 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}.$$

3. Date le condizioni del problema, i tempi medi di scattering sono gli stessi per elettroni e lacune

$$\tau_p = \tau_n = \tau = \frac{m^* \mu}{e}.$$

La massa efficace m^* si ricava invertendo la (3)

$$m^* = \left[4n_i(T_2) \left(\frac{2K_B T_2}{\pi \hbar^2} \right)^{-3/2} \exp \left(\frac{E_G}{2K_B T_2} \right) \right]^{2/3} = 4.5 \cdot 10^{-30} \text{ Kg},$$

e quindi risulta essere $\tau = 6.0 \cdot 10^{-14} \text{ s}$.

4. Per un semiconduttore drogato di tipo n, si ha

$$n = N_C \exp \left[\frac{\mu - E_C}{K_B T} \right]. \quad (4)$$

Essendo il semiconduttore in regime di saturazione possiamo porre $n \simeq N_D$. L'ipotesi di non degenerazione è

$$\frac{E_C - \mu}{K_B T} \gg 1.$$

Nel nostro caso

$$\frac{E_C - \mu}{K_B T_1} = \ln \left(\frac{N_C}{N_D} \right) = 17.0.$$

L'ipotesi di non degenerazione risulta quindi essere soddisfatta.