Scritto Appello II, Materia Condensata. AA 2017/2018

19/02/2018

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 ha una struttura tetragonale con parametri reticolari $a = 1.0 \text{ \AA}$ e $b = 2a$ e viene studiato con il metodo delle polveri. I tre atomi sono individuati dai vettori di base $\vec{d}_A = \vec{0}$, $\vec{d}_{B_1} = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y})$ e $\vec{d}_{B_2} = -\frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y})$. 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. Il secondo picco si trova in corrispondenza dell'angolo $\theta^{(2)} = 35^\circ$. Determinare il valore della lunghezza d'onda della radiazione incidente λ . (2.5 punti)
3. Determinare la distanza dei piani della famiglia $\{1, 1, 1\}$. (2 punti)

2 Esercizio 2

Un solido anisotropo e monoatomico ha reticolo *bcc* con lato della cella cubica $a = 2.5 \text{ \AA}$. Le relazioni di dispersioni dei modi acustici longitudinali e trasversi sono

$$\omega_L(q) = \omega_0 \sin\left(\frac{qa}{2}\right),$$
$$\omega_T(q) = \omega_0 \left[\sin\left(\frac{qa}{2}\right) + \sin(qa) \right].$$

con $\omega_0 = 5 \times 10^{12}$ rad/s. La costante elastica di accoppiamento tra gli atomi è $C = 114.1$ dyne/cm.

1. Trovare la densità ρ . (1 punto)
2. Calcolare le velocità del suono $v_s^{L,T}$. (2.5 punti)
3. Calcolare la capacità termica del solido per unità di massa a $T = 20$ K. (3 punti)
4. Calcolare la capacità termica del solido per unità di massa nel limite di alte temperature. (1 punto)

3 Esercizio 3

Sia data una catena monoatomica lineare disposta lungo l'asse $\hat{x}$ di passo reticolare $a = 2.5 \text{ \AA}$. Su ogni nodo è disposto un atomo bivalente.

1. Scrivere la forma esplicita delle bande $E_s(\vec{k})$ e $E_{p_z}(\vec{k})$ risultanti dall'approssimazione a tight binding a primi vicini da funzioni di tipo s e p_z . Si trascurino le interazioni $s - p_z$. Siano $E_{0,s} = 1.0 \text{ eV}$, $E_{0,p_z} = 2.5 \text{ eV}$, $|\gamma_s| = 0.1 \text{ eV}$, $|\gamma_{p_z}| = 0.3 \text{ eV}$. (3 punti)
2. Disegnare le bande di energia. Quanto vale l'energia di gap a bordo e centro zona? (2 punti)
3. Il materiale si comporta come isolante o come conduttore? Quanto vale l'energia di Fermi? (1.5 punti)
4. Calcolare la massa efficace degli elettroni della banda s a centro zona Γ e a bordo zona. (1 punto)

4 Esercizio 4

Dato un semiconduttore drogato, si ha che la costante di Hall vale $R_H = 2.5 \text{ C}^{-1} \text{ m}^3$ tra $T_1 = 150 \text{ K}$ e $T_2 = 400 \text{ K}$. A T_2 la densità degli stati della banda di valenza vale $3.4 \times 10^{22} \text{ m}^{-3}$. Le masse efficaci di elettroni e lacune sono uguali ed indipendenti dalla temperatura.

1. Che tipo di drogaggio è e quanto vale? (2 punti)
2. Quanto vale l'energia di ionizzazione ϵ_d sapendo che $E_g = 30 \epsilon_d$? (2.5 punti)
3. Qual'è la densità di portatori minoritari a $T_3 = 250 \text{ K}$? (3 punti)

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

5 Soluzioni

5.1 Esercizio 1

In un cristallo tetragonale con vettori di base:

$$\begin{cases} \vec{t}_1 = a \hat{x} \\ \vec{t}_2 = a \hat{y} \\ \vec{t}_3 = b \hat{z} \end{cases}$$

i vettori di base dello spazio reciproco sono:

$$\begin{cases} \vec{g}_1 = \frac{2\pi}{a} \hat{x} \\ \vec{g}_2 = \frac{2\pi}{a} \hat{y} \\ \vec{g}_3 = \frac{2\pi}{b} \hat{z} = \frac{\pi}{a} \hat{z} \end{cases}$$

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

$$\begin{aligned} \vec{G} &= h \vec{g}_1 + k \vec{g}_2 + l \vec{g}_3 = \\ &= \frac{2\pi}{a} \left(h, k, \frac{l}{2} \right), \end{aligned}$$

otteniamo

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

Infine,

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

Di conseguenza, dato che h e k sono interi,

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

Dato che $I \propto |F(\vec{G})|^2$, tutti i picchi permessi hanno la stessa intensità.

2. I primi cinque vettori del reticolo reciproco ordinati per modulo crescente sono:

$$\begin{aligned}\vec{G}_1 = \vec{g}_3 &\rightarrow |\vec{G}_1| = \frac{\pi}{a}, \\ \vec{G}_2 = \vec{g}_1 &\rightarrow |\vec{G}_2| = \frac{2\pi}{a}, \\ \vec{G}_3 = \vec{g}_1 + \vec{g}_3 = \frac{\pi}{a}(2, 0, 1) &\rightarrow |\vec{G}_3| = \frac{\pi\sqrt{5}}{a}, \\ \vec{G}_4 = \vec{g}_1 + \vec{g}_2 = \frac{2\pi}{a}(1, 1, 0) &\rightarrow |\vec{G}_4| = \frac{\pi 2\sqrt{2}}{a}, \\ \vec{G}_5 = \vec{g}_1 + \vec{g}_2 + \vec{g}_3 = \frac{\pi}{a}(2, 2, 1) &\rightarrow |\vec{G}_5| = \frac{3\pi}{a},\end{aligned}$$

Dal momento che, secondo le regole di selezione prima trovate, si ha estinzione per le riflessioni associate ai vettori $\vec{G}_2$ e $\vec{G}_3$, il secondo picco visibile è associato a $\vec{G}_4$.

Invertendo la formula per la condizione di interferenza costruttiva

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

e usando il valore del modulo di $\vec{G}_4$, si ottiene

$$\lambda = a\sqrt{2} \sin\left(\frac{\theta^{(2)}}{2}\right) = 0.43 \text{ \AA}.$$

3. Ai piani della famiglia $\{1, 1, 1\}$ è associato il vettore $\vec{G}_5$ di modulo $\frac{3\pi}{a}$. Di conseguenza la distanza tra i piani cristallini cercata sarà

$$d_{1,1,1} = \frac{2\pi}{|\vec{G}_5|} = \frac{2\pi}{\frac{3\pi}{a}} = \frac{2}{3}a = 0.66 \text{ \AA}.$$

5.2 Esercizio 2

1. In questo caso a bordo zona tutte le branche acustiche assumono lo stesso valore ω_0 , di conseguenza si ha

$$\omega_{MAX} = \omega_0 = 2\sqrt{\frac{C}{M}}.$$

Invertendo tale relazione si ottiene

$$M = \frac{4C}{\omega_0^2} = 11 \text{ u.m.a.}$$

e quindi

$$\rho = \frac{2M}{a^3} = 2.3 \text{ g/cm}^3.$$

2. La velocità del suono è data da

$$v_s = \lim_{q \rightarrow 0} \frac{d\omega(q)}{dq}.$$

Si avrà per le due branche

$$v_s^L = \lim_{q \rightarrow 0} \omega_0 \frac{a}{2} \cos\left(\frac{qa}{2}\right) = \omega_0 \frac{a}{2} = 6.25 \times 10^2 \text{ m/s},$$

$$v_s^T = \lim_{q \rightarrow 0} \omega_0 \left[\frac{a}{2} \cos\left(\frac{qa}{2}\right) + a \cos(qa) \right] = \omega_0 \frac{3a}{2} = 1.88 \times 10^3 \text{ m/s}.$$

3. Per calcolare la capacità termica dobbiamo prima trovare le temperature di Debye $\Theta_D^{L,T}$. Per un reticolo tridimensionale *bcc* si ha $n = 2/a^3$ e il vettore d'onda di Debye è

$$q_D = \sqrt[3]{6\pi^2 n} = \frac{\sqrt[3]{12\pi^2}}{a} = 1.96 \times 10^{10} \text{ m}^{-1}$$

e le temperature di Debye sono

$$\Theta_D^L = \frac{\hbar}{K_B} \omega_D^L = \frac{\hbar}{K_B} v_s^L q_D = 93.5 \text{ K},$$

$$\Theta_D^T = \frac{\hbar}{K_B} \omega_D^T = \frac{\hbar}{K_B} v_s^T q_D = 280.5 \text{ K}.$$

Entrambe le temperature di Debye sono maggiori di T , si può quindi usare l'approssimazione di Debye. Ci sono tre branche acustiche, una longitudinale e due trasverse, di conseguenza la capacità termica per unità di massa è:

$$c_v(T) = \frac{C_v(T)}{M} = \frac{4}{5} \pi^4 \frac{1}{\rho a^3} K_B T^3 \left[\frac{1}{(\Theta_D^L)^3} + \frac{2}{(\Theta_D^T)^3} \right],$$

che a $T = 20 \text{ K}$ vale

$$c_v(20 \text{ K}) = 3.1 \times 10^{-1} \text{ J/K g}.$$

4. Ad alte temperature ci troviamo nel limite classico (Dulong-Petit). Tutte e tre le branche acustiche contribuiscono allo stesso modo

$$c_v = 3 \frac{1}{\rho a^3} K_B = 1.15 \text{ J/K g}.$$

5.3 Esercizio 3

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_z , si ottiene

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

La sovrapposizione tra orbitali s e quella tra orbitali p_z sono entrambe positive, di conseguenza $\gamma_s > 0$ e $\gamma_{p_z} > 0$. Alla fine le bande di energia avranno la forma

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

2. Dal disegno delle bande di energia risulta evidente come i minimi e i massimi sulle due bande si abbiano per gli stessi valori del vettore d'onda $\vec{k}$. In particolare a centro zona ($k = 0$) si hanno i minimi $E_s^{MIN} = 0.8 \text{ eV}$ e $E_{p_z}^{MIN} = 1.9 \text{ eV}$, mentre a bordo zona ($k = \pm\pi/a$) si hanno i massimi $E_s^{MAX} = 1.2 \text{ eV}$ e $E_{p_z}^{MAX} = 3.1 \text{ eV}$. A centro zona la distanza tra le due bande risulta essere $E_{p_z}^{MIN} - E_s^{MIN} = 1.1 \text{ eV}$, mentre a bordo zona $E_{p_z}^{MAX} - E_s^{MAX} = 1.9 \text{ eV}$.
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

$$E_F = E_s\left(\frac{\pi}{a}\right) = 1.2 \text{ eV}.$$

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

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

da cui i valori richiesti

$$\begin{aligned} m_s^*(0) &= \frac{\hbar^2}{2a^2|\gamma_s|} = 5.55 \times 10^{-30} \text{ Kg}, \\ m_s^*(\pi/a) &= -\frac{\hbar^2}{2a^2|\gamma_s|} = -5.55 \times 10^{-30} \text{ Kg}. \end{aligned}$$

5.4 Esercizio 4

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 di ottiene

$$N_A = \frac{1}{e R_H} = 2.5 \times 10^{18} \text{m}^{-3}.$$

2. A T_2 sia 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

$$E_g = -2 K_B T_2 \ln \left(\frac{N_A}{N_V(T_2)} \right) = 0.66 \text{ eV}.$$

A questo punto l'energia di ionizzazione dei donori sarà

$$\epsilon_d = \frac{E_g}{30} = 0.02 \text{ eV}.$$

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

$$N_V(T_3) = N_V(T_2) \left(\frac{T_3}{T_2} \right)^{3/2} = 1.7 \times 10^{22} \text{ m}^{-3}.$$

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

$$n(T_3) = \frac{N_V^2(T_2) \left(\frac{T_3}{T_2} \right)^3 e^{-\frac{E_g}{K_B T_3}}}{N_A} = 5.8 \times 10^{12} \text{ m}^{-3}.$$