

ESERCIZIO 1

Eseguendo un esperimento di diffrazione con il metodo delle polveri con radiazione elettromagnetica di lunghezza d'onda $\lambda = 1 \text{ \AA}$ su un cristallo monoatomico, i primi massimi di diffrazione si osservano ad i seguenti angoli (rispetto direzione incidenza):

42.8°

73.2°

89°

115°

- 1) Riconoscere se il solido analizzato ha struttura cristallina BCC, FCC o diamante.
- 2) Determinare il lato della cella cubica e la distanze dei primi e secondi vicini.

ESERCIZIO 2

Un solido ha una struttura cristallina cubica semplice con base. Sia $a = 4.3 \text{ \AA}$ il lato del cubo e siano $d_1 = (0,0,0)$ e $d_2 = (a/2)(x+y+z)$ i vettori posizione degli atomi della base. Su tale solido si esegue un esperimento di diffrazione dei raggi X utilizzando il metodo delle polveri.

- Dire a quali angoli si osservano i primi quattro anelli di diffrazione se si usa una radiazione di lunghezza d'onda $\lambda = 3 \text{ \AA}$.

Sapendo che il rapporto tra i fattori di forma dei due atomi è $f_1/f_2 = 0.5$

- determinare il rapporto di intensità tra il più intenso ed il più debole degli anelli osservati.

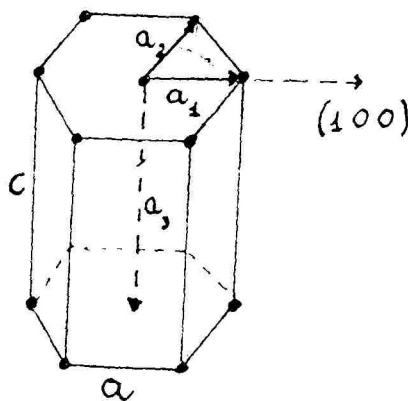
ESERCIZIO 3

Si esegue un esperimento di diffrazione con il metodo delle polveri su un cristallo biatomico AB con una radiazione di lunghezza d'onda $\lambda = 1.6 \text{ \AA}$. I primi due anelli di diffrazione vengono osservati a 40.35° e 47.15°.

- Dire se la struttura cristallina è cubica semplice con base in $(0,0,0)$ e $(a/2)(x+y+z)$ o cubica a facce centrate con base in $(0,0,0)$ e $(a/4)(x+y+z)$
- Determinare il rapporto delle intensità dei due anelli osservati sapendo che il rapporto tra i due fattori di forma è $f_B/f_A = 1.8$

ESERCIZIO 4

Un solido monoatomico ha la struttura cristallina esagonale mostrata in figura.



Scrivere in termini di a e c i vettori di reticolo reciproco.

Determinare il valore di a e c sapendo che in un esperimento di diffrazione con il metodo delle polveri e con una radiazione di lunghezza d'onda $\lambda = 1.0 \text{ \AA}$ si osservano i primi massimi di intensità agli angoli

24.05°

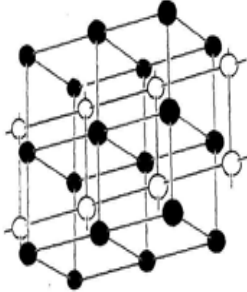
45.23°

49.21°

51.88°

ESERCIZIO 5

In un cristallo di CsBr gli atomi di cesio sono disposti sui vertici di un cubo di lato $a = 4.29 \text{ \AA}$ e gli atomi di bromo sono disposti al centro dello stesso cubo cos' come mostrato in figura.



- Scrivere l'espressione per i generici vettori del reticolo di Bravais diretto e del corrispondente reticolo reciproco e la posizione degli atomi di base all'interno della cella unitaria.
- si trovino i primi 4 angoli di diffrazione osservati in un esperimento con il metodo delle polveri e una radiazione di lunghezza d'onda $\lambda = 2.1 \text{ \AA}$

ESERCIZIO 6

Si consideri un solido biatomico AB unidimensionale di parametro reticolare $a = 3 \text{ \AA}$. I due atomi costituenti la base sono posizionati a $d_A = 0$ $d_B = a/2$.

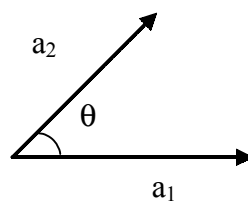
Il potenziale cristallino è dato da:

$$U(r) = V(r + d_A) + \frac{1}{2} V(r + d_B), \text{ con } V(r) = \sum_G V_G e^{iG \cdot r}$$

Noto che $V_{2\pi/a} = 0.2 \text{ eV}$ e $V_{4\pi/a} = 0.1 \text{ eV}$, determinare l'ampiezza e la posizione in k nella prima zona di Brillouin della gap corrispondente alle componenti armonica specificate.

ESERCIZIO 7

Si consideri il reticolo di Bravais bidimensionale definito dai vettori \mathbf{a}_1 e \mathbf{a}_2 così come in figura:



Con $|\mathbf{a}_1| = 3 \text{ \AA}$ $|\mathbf{a}_2| = 2 \text{ \AA}$, $\theta = 60^\circ$.

- Si determinino i vettori primitivi del reticolo reciproco e si disegni la prima zona di Brillouin
- Si scrivano i primi tre termini U_1 , U_2 , U_3 della serie di Fourier del potenziale cristallino $U(\mathbf{r})$ corrispondenti ai tre vettori di reticolo reciproco di modulo minore (si prenda $U_0 = 0$)
- Riferendosi al modello dell'elettrone quasi libero si dica per quali valori di \mathbf{k} l'energia ha una gap di valore $2U_1$, $2U_2$, $2U_3$.

ESERCIZIO 8

Sia dato il reticolo cristallino bidimensionale generato dai vettori primitivi:

$$a_1 = \frac{a}{\sqrt{2}}(\hat{x} + \hat{y})$$

$$a_2 = \frac{a}{\sqrt{2}}(-\hat{x} + \hat{y})$$

Tale reticolo (monoatomico) genera un potenziale cristallino debole dato da

$$U(\vec{r}) = A \left[\cos\left(\frac{2\pi}{a} \sqrt{2}x\right) + \cos\left(\frac{2\pi}{a} \sqrt{2}y\right) \right]$$

- 1) Disegnare la I zona di Brillouin del reticolo reciproco
- 2) Determinare il grado di degenerazione degli stati elettronici all'interno della 1ª ZB e alla sua frontiera nell'approssimazione di elettrone libero.
- 3) Determinare se e come viene rimossa tale degenerazione considerando la correzione perturbativa al primo ordine introdotta dal potenziale $U(r)$.
- 4) Calcolare in tale approssimazione l'energia a bordo zona nelle direzioni (1,0) e (1,1) (assumere $E(0,0)=0$).

ESERCIZIO 9

Sia dato un reticolo rettangolare, nello spazio diretto, di lati a e b .

- a) Si disegni la prima zona di Brillouin e si scrivano le coordinate di k al bordo zona nelle direzioni (1,0), (0,1) ed (1,1).

Si supponga che il potenziale cristallino abbia la forma seguente:

con $A=2$ eV, $B=1$ eV, $C=0.8$ eV

$$U(x,y) = A \cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right) + B \cos\left(\frac{2\pi}{b}y\right) + C \left[\cos\left(\frac{2\pi}{a}x + \frac{2\pi}{b}y\right) + \cos\left(\frac{2\pi}{a}x - \frac{2\pi}{b}y\right) \right]$$

Utilizzando il metodo dell'elettrone quasi libero

- b) Si determini la gap al bordo zona nella direzione (1,0) e (0,1)
- c) Si scriva inoltre la matrice dalla cui diagonalizzazione si ricavano i valori dell'energia al bordo zona nella direzione (1,1)

ESERCIZIO 10

Si consideri un reticolo bidimensionale esagonale di parametro reticolare a .

- a) Disegnare il reticolo reciproco e la prima zona di Brillouin determinando i valori di k a bordo zona nelle direzioni (1,0) e (0,1).
- b) Supponendo noti i coefficienti di Fourier del potenziale cristallino $V(r)$ ed utilizzando il metodo dell'elettrone quasi libero, scrivere i determinanti le cui soluzioni danno le energie a bordo zona nelle direzioni (1,0) e (0,1).

ESERCIZIO 11

Si consideri un ipotetico solido bidimensionale con struttura esagonale con base centrale di lato a .

Utilizzando il metodo del tight binding si scriva l'espressione della banda di energia derivante dagli orbitali s . (Si trascuri l'integrale di sovrapposizione, si consideri l'interazione a primi e si indichino con γ_p e γ_s i rispettivi integrali di trasferimento).

ESERCIZIO 12

In un reticolo bidimensionale quadrato di costante reticolare $a = 2.4 \text{ \AA}$ e' posto un atomo per cella con un elettrone di valenza di tipo s .

a) Si scriva l'espressione della banda di energia derivante dagli orbitali s nell'approssimazione del tight binding, limitando la somma sui siti reticolari ai secondi vicini, e trascurando gli integrali di sovrapposizione. (Si indichino con γ_1 e γ_2 gli integrali di trasferimento)

b) Sapendo che gli estremi della banda si trovano a $\mathbf{k}=(0,0)$ e $\mathbf{k} = (\pi/a, \pi/a)$ si scriva l'espressione per l'ampiezza di banda

ESERCIZIO 13

Si consideri un ipotetico solido bidimensionale con reticolo quadrato nel piano xy . In ogni punto reticolare si considerino un orbitale s , un orbitale p_x ed un orbitale p_y . Si supponga che l'energia dell'orbitale s sia molto più bassa di quella dei due orbitali p , tra loro degeneri. Utilizzando il metodo del tight binding ai primi vicini:

a) Si scriva l'espressione dell'energia in funzione di \mathbf{k} per la banda derivante dall'orbitale s .

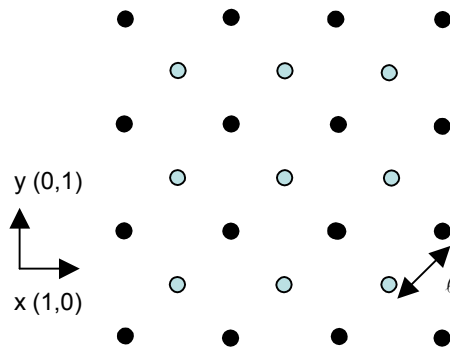
b) Si scriva il sistema di equazioni da cui si ricava l'espressione dell'energia in funzione di \mathbf{k} per le bande derivante dagli orbitali p_x e p_y . Si trascuri l'integrale di sovrapposizione α e si indichino con β_{ij} gli elementi di matrice del potenziale ΔU e con γ_{ij} gli integrali di trasferimento.

c) Ricordando che il potenziale ΔU e' una funzione pari in x ed y e che gli orbitali p_x e p_y sono rispettivamente del tipo $x f(r)$ ed $y f(r)$ dire quali tra i β_{ij} e γ_{ij} sono nulli e quali sono tra loro uguali.

d) Tenendo conto dei risultati del punto precedente scrivere l'espressione delle bande derivanti dagli orbitali p .

ESERCIZIO 14

Un cristallo bidimensionale contiene due tipi di atomi situati in posizioni alterne ai vertici di un quadrato di lato ℓ come in figura.



- Costruire due vettori primitivi \mathbf{a}_1 e \mathbf{a}_2 e determinare il numero di atomi contenuti nella cella unitaria bidimensionale.
- Disegnare la I zona di Brillouin determinando il valore di \mathbf{k} a bordo zona nelle direzioni $(1,0)$, $(0,1)$ e $(1,1)$.
- Assunti noti i coefficienti dello sviluppo in serie di Fourier del potenziale cristallino, determinare il valore dell'energia elettronica nei suddetti punti \mathbf{k} nell'approssimazione di elettrone quasi-libero (si assuma $E(0,0)=0$) e la massa efficace a $\mathbf{k}=0$.

ESERCIZIO 15

Le vibrazioni reticolari di un metallo monoatomico e monovalente con un reticolo cubico semplice di costante reticolare $a=1.5 \text{ \AA}$ sono ben descritte dal modello di Debye con temperatura di Debye $\theta_D = 150^\circ\text{K}$.

- Calcolare il calore specifico a 30 K e a 700 K.

- Come cambiano tali valori in un solido con lo stesso reticolo cristallino e la stessa temperatura di Debye ma con 2 atomi per cella elementare?
- Calcolare l'energia di Fermi e dire se è rilevante il contributo degli elettroni al calore specifico alle temperature indicate

ESERCIZIO 16

Lo stagno cristallizza FCC con parametro di cella misurato a 0 K, $a_0=6.39 \text{ \AA}$. Noto che la sua temperatura di Debye è $\theta_D = 260 \text{ K}$, che il parametro reticolare si espande secondo la legge $a(T)=a_0(1+\alpha T)$ con $\alpha=23 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$, e che e' tetravalente:

- Calcolare la velocità del suono nello stagno.
- Calcolare il calore specifico e l'energia di Fermi a 50 K e a 500 K.

ESERCIZIO 17

Calcolare la capacità termica di 1 cm^3 di Ag a 10 K nell'approssimazione di Debye. E' noto che la velocità del suono nell'argento è di $2.6 \cdot 10^5 \text{ cms}^{-1}$ e che l'Ag cristallizza nel sistema cubico a facce centrate con lato della cella convenzionale pari a 4.07 \AA .

ESERCIZIO 18

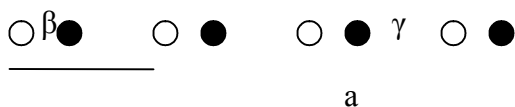
Calcolare il valore massimo della pulsazione dei modi normali di vibrazione, la velocità del suono e il numero medio di fononi a 500 K in un cristallo di Pb.

Si utilizzi il modello di Debye ($\theta_D=88 \text{ K}$) tenendo presente che il Pb cristallizza FCC con lato della cella convenzionale pari a $a=5 \text{ \AA}$.

- Si determini la velocità di Fermi nel Pb (si assuma $m^*=m_e$). Qual'è il cammino libero medio elettronico per urti con fononi a 500 K? Quanto valgono il tempo di rilassamento τ e la conducibilità a 500 K?(Si assuma la probabilità di diffusione e-fonone =1)

ESERCIZIO 19

Sia dato un reticolo cristallino unidimensionale di parametro $a=3 \text{ \AA}$, con base biatomica $d_1=0$ $d_2=a/3$. In ogni sito di reticolo sono presenti ioni di massa $M=21 \text{ u.m.a.}$. L'interazione ione-ione può essere descritta con una approssimazione elastica con due costanti di forza a primi vicini $\beta=5 \text{ Nm}^{-1}$ e $\gamma=1 \text{ Nm}^{-1}$ così come descritto in figura:



- Descrivere i moti ionici a $k=0$.
- Determinare la velocità del suono, il vettore di Debye (in una dimensione) e la temperatura di Debye del sistema.

ESERCIZIO 20

Sia dato un solido cristallino bidimensionale con reticolo rettangolare definito dai vettori primitivi $\vec{a}_1 = a\hat{x}$, $\vec{a}_2 = b\hat{y}$, con $a=2/3 b$. In ogni sito reticolare sono presenti ioni con orbitali di valenza s. Disegnare la prima zona di Brillouin del reticolo reciproco.

- Supponendo noti gli integrali di trasferimento γ e quelli colombiani β , scrivere l'espressione delle bande elettroniche lungo le direzioni x e y così come calcolate in approssimazione tight binding a primi e secondi vicini. Si trascurino gli integrali di sovrapposizione.
- Calcolare gli elementi del tensore della massa efficace per stati a $k=0$.

ESERCIZIO 21

Sia dato un semiconduttore intrinseco. Alle temperature $T_1 = 700$ K e $T_2 = 400$ K la conducibilità vale rispettivamente $\sigma_1 = 1630 \Omega^{-1} \text{m}^{-1}$, $\sigma_2 = 2.5 \Omega^{-1} \text{m}^{-1}$

La mobilità degli elettroni e delle lacune è ben rappresentata dalle espressioni $\mu_n = \mu_{0,n} (T/300)^{-1.5}$ e $\mu_p = \mu_{0,p} (T/300)^{-1.5}$.

- Determinare il valore della energia di gap.
- Sapendo che le masse efficaci di elettroni e lacune valgono rispettivamente $0.2 m_e$ e $0.9 m_e$ determinare la quantità $\mu_0 = \mu_{0,n} + \mu_{0,p}$

ESERCIZIO 22

Sia dato un solido semiconduttore avente reticolo cubico semplice di lato a .

La relazione di dispersione per le bande di conduzione e di valenza è ben descritta dalle

$$E_c = C - B[\cos(k_x a) + \cos(k_y a) + \cos(k_z a)]$$

$$E_v = A[k_x^2 + k_y^2 + k_z^2]$$

- Disegnare la cella di Brillouin tridimensionale, la relazione di dispersione nella direzione x . (esplicitando il valore dell'energia elettronica a bordo zona) e calcolare il valore dell'energia di gap.
- Calcolare i termini del tensore di massa efficace di elettroni e lacune per $k=0$.
- Calcolare il rapporto tra il numero dei portatori a $T=200$ K e a $T=400$ K.

DATI: $C = 4$ eV; $B = 1$ eV; $A = -0.5$ eV \AA^2 ; $a = 1$ \AA

ESERCIZIO 23

Un metallo ha una banda di conduzione data da $E(k) = E_0(1 - \cos ak)$ con $a = 2.5$ \AA e $E_0 = 10.0$ eV. sapendo che la densità del metallo è 1.5×10^{23} at/cm³, che ciascun atomo contribuisce con 1 elettrone di conduzione, calcolare il livello di Fermi a 0K.

Sapendo che $\sigma = 4.3 \times 10^9$ (Ωm)⁻¹ calcolare il tempo di rilassamento e il libero cammino medio degli elettroni.

ESERCIZIO 24

Sia dato un semiconduttore drogato con 10^{21}m^{-3} impurezze donatrici. Si considerino le tre temperature $T_1 = 750$ K, $T_2 = 450$ K, $T_3 = 120$ K. T_1 e T_2 cadono nella regione intrinseca, T_3 nella regione estrinseca. Ad esse corrispondono le conducibilità $\sigma_1 = 12.69$ (Ωm)⁻¹, $\sigma_2 = 2.6$ (Ωm)⁻¹, $\sigma_3 = 0.0041$ (Ωm)⁻¹.

- Nella regione intrinseca il tempo di scattering degli elettroni e delle lacune sono ben rappresentati dalle espressioni $\tau_n = \tau_{0,n} (T/300)^{-1.5}$ e $\tau_p = \tau_{0,p} (T/300)^{-1.5}$. Determinare il valore della energia di gap.
- Nella regione estrinseca si ha $\tau_n = \tau_{\text{ext}} = 5 \cdot 10^{-17}$ s, praticamente indipendente dalla temperatura. Determinare la massa efficace degli elettroni.
- Sapendo che la massa efficace delle lacune è il doppio di quella degli elettroni determinare approssimativamente la temperatura che divide la regione intrinseca da quella estrinseca.