

Fisica della Materia Condensata I

a.a. 2022/23

19 settembre 2023

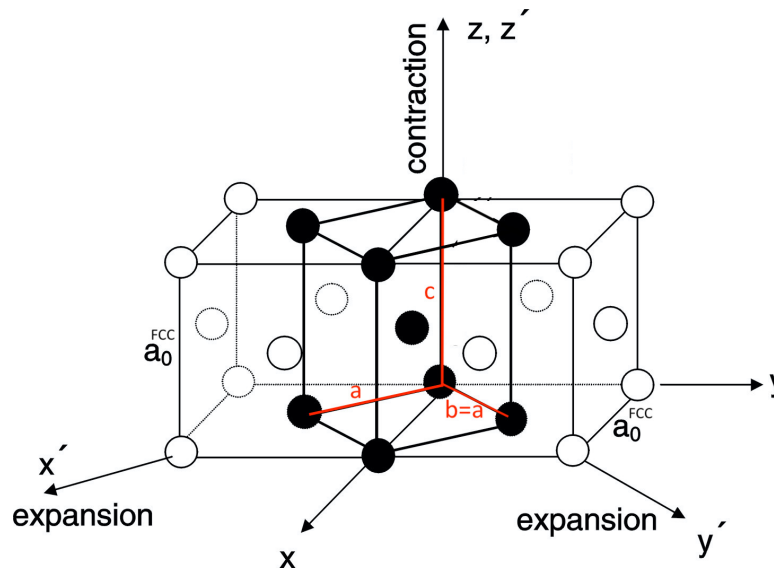
(Tempo: 2h30')

Esercizio 1: Deformazione della struttura cristallina del Ferro

Il ferro (Fe) passa da struttura BCC (α -Fe, ferrite, $a_0^{BCC}=2.86 \text{ \AA}$) a FCC (γ -Fe, austenite, $a_0^{FCC}=3.63 \text{ \AA}$) e viceversa per effetto della temperatura a $T = 1183 \text{ K}$.

1. Di quanto varia in percentuale il volume per atomo nella transizione $FCC \Rightarrow BCC$? (specificare il segno)
2. In figura è rappresentata la fase FCC; è marcata una cella tetragonale, che è una possibile cella di base (non unitaria) della struttura FCC. Si può pensare che la transizione avvenga in modo continuo per deformazione (cammino di Bain), e in particolare che la fase BCC si ottenga da quella FCC con una contrazione lungo l'asse z e un'espansione isotropa nel piano (x, y) della cella tetragonale.

Nell'ipotesi che il volume per atomo rimanga costante, calcolare la variazione percentuale dei parametri di cella a, b, c nella trasformazione $FCC \Rightarrow BCC$.



Esercizio 2: Diffrazione da un reticolo 2D

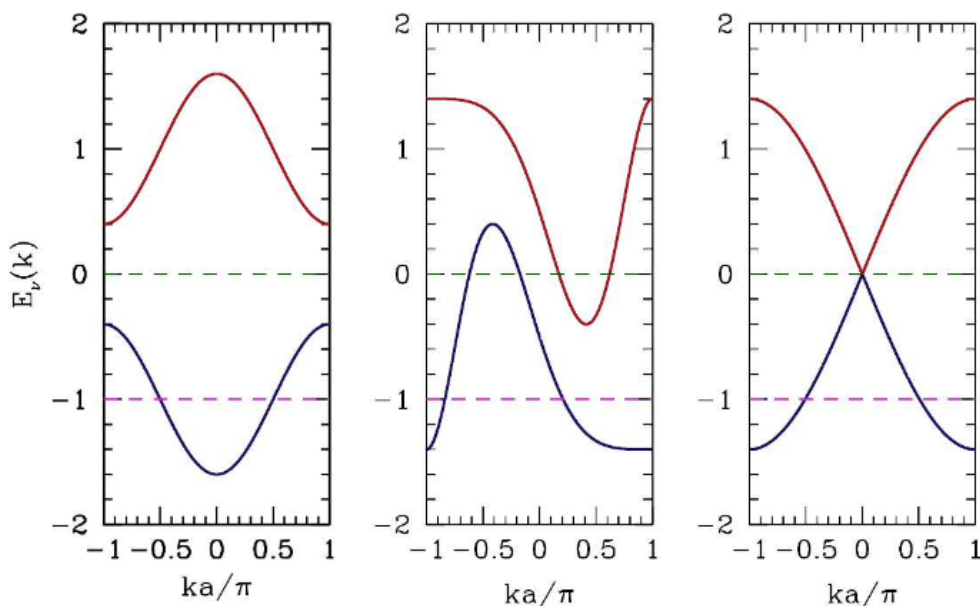
Uno strato monoatomico di fosforo di boro (BP) ha la stessa struttura del grafene ma con due atomi diversi nella cella di base (passo reticolare a). Considerare un atomo di B all'origine.

1. Scrivere il fattore di struttura $S(\vec{K})$ per il BP per un generico vettore di reticolo reciproco \vec{K} .
2. Quali sono tutti e soli i valori che $S(\vec{K})$ può assumere?

Esercizio 3: Metalli e isolanti a $T=0K$

La figura rappresenta tre diversi casi di bande elettroniche di cristalli 1D con passo reticolare a . Le linee blu/rosse rappresentano la prima/seconda banda, rispettivamente.

1. Per ciascuno dei tre casi, esiste un gap di energia proibita, e, se sì, quanto vale?
2. Quando $E_F = -1$ eV (curva tratteggiata viola), quale/i di questi sistemi è/sono metallico/i? Qual è il riempimento della banda più bassa in questo caso?
3. Quando $E_F = 0$ eV (curva tratteggiata verde), per ciascuno dei tre sistemi identificare il comportamento dal punto di vista elettronico (metallico, isolante, o ...) e esplicitare com'è la densità elettronica $g(E_F)$ (nulla, non nulla, ...).
4. Considerando il modello semiclassico, come è la velocità degli elettroni in prossimità del punto $k=0$ nel sistema raffigurato a destra?



Esercizio 4: Semiconduttori

L'arsenico è presente come impurezza in un campione di silicio. La massa effettiva di un elettrone nella banda di conduzione del silicio è di circa 0,31 m , la costante dielettrica del silicio è 12 e il gap energetico nel silicio è 1,1 eV. Considerando valido il modello idrogenoide:

1. Calcolare il raggio della prima orbita di Bohr dell'elettrone.
2. Calcolare l'energia di ionizzazione, in meV, di questo elettrone. Ci si aspetta che la maggior parte dei donatori venga ionizzata a temperatura ambiente? Motivare la risposta.

NOTA:

Dare tutti i passaggi necessari per comprendere il procedimento con cui si è arrivati alla soluzione. Se si usano formule note, indicare da dove si parte. Risposte con il risultato finale solo o con dettagli insufficienti non saranno considerate valide.