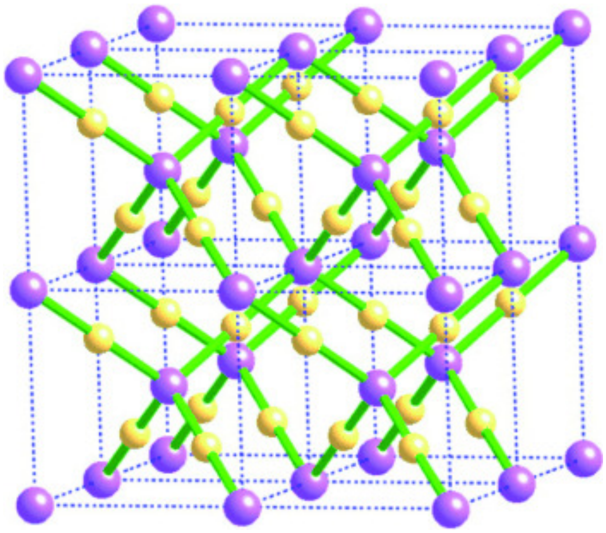
Fisica della Materia Condensata I
II appello sessione invernale a.a. 2021/22
17 febbraio 2022

(*Tempo: 2h30'*)

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.

Esercizio 1: Strutture cristalline

L'acqua ad alte pressioni (sopra i 60 GPa) assume una fase cristallina particolare, nota come *"ice X"*, indicata in figura (atomi grandi/piccoli sono O/H), dove i legami O–H son tutti uguali.



1. Descrivere il reticolo cristallino (reticolo di Bravais che ad esso sottende e suoi vettori primitivi; cella unitaria elementare; numero di atomi che costituiscono la base interna alla cella unitaria e loro coordinate).
2. Calcolare il fattore di struttura $S(\vec{K})$.
3. Calcolare la condizione di annullamento dei picchi corrispondenti agli atomi di O; giustificare il risultato.
4. Calcolare quanto vale $S(\vec{K})$ per il vettore $\vec{K} = \dfrac{2\pi}{a}(100)$ (e analoghi per scambio di coordinate o cambio segno); giustificare il risultato.

Esercizio 2: Semiconduttori e approssimazione di massa efficace

Supponiamo di avere un semiconduttore 2D su reticolo quadrato di lato a, con bande di conduzione e di valenza descritte dalle relazioni di dispersione:

$$E_c(k_x,k_y) = E_G - 2\gamma_c[\cos(ak_x)+\cos(ak_y)-2], \qquad \gamma_c>0,\ E_g>0$$

$$E_v(k_x,k_y) = 2\gamma_v[\cos(ak_x)+\cos(ak_y)-2], \qquad \gamma_v>0$$

1. Sapendo che si tratta di un semiconduttore, quale dev'essere la relazione di diseguaglianza tra E_G, γ_c, γ_v, a? Giustificare la risposta.

2. Fare un grafico (quantitativamente e non solo qualitativamente corretto) delle bande (entrambe nello stesso grafico) lungo il percorso X-Γ-M, dove X è metà della faccia della prima zona di Brillouin e M è lo spigolo, indicando i valori di E_c ed E_v.

3. Scrivere per entrambe le bande attorno al punto Γ un'espressione approssimata quadratica in $k=\sqrt{k_x^2+k_y^2}$, scrivendo i coefficienti dell'espansione in termini dei parametri E_G, γ_c, γ_v, a.

4. Scrivere (in modo quantitativamente e non solo qualitativamente corretto) l'espressione per la densità di stati agli estremi di entrambe le bande, sempre in funzione dei parametri E_G, γ_c, γ_v, a.

Esercizio 3: Potenziali cristallini

Considerare l'hamiltoniana $\mathcal{H}$ di singolo elettrone in un cristallo 1D di passo reticolare a:

$$\mathcal{H} = \frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} + U(x) \quad \text{dove} \qquad U(x) = -V_0\cos^2\left(\frac{\pi}{a}x\right).$$

1. Scrivere l'espansione in componenti di Fourier del potenziale cristallino, calcolando poi esplicitamente tutte quelle non nulle. $U(x)=\sum_{G_m} U_{G_m}\exp(iG_m x)$ dove $G_m=\pm\frac{2\pi}{a}m$ ma le uniche componenti non nulle sono $U_0=-\frac{V_0}{2a}; U_{G_{\pm1}}=-\frac{V_0}{4a}$.

2. Scrivere l'espansione in onde piane di una funzione di Bloch $\psi_q(x)$ autostato dell'hamiltoniana suddetta, esplicitando gli argomenti delle onde piane, l'indice su cui corre l'espansione, da quali indici/parametri dipendono i coefficienti.
$\psi_q(x)=\sum_m c_{q,m}\exp i(q+\frac{2\pi}{a}m)x$

3. Disegnare il potenziale cristallino: $U(x) = -V_0\sum_n \left[\delta\left(x-na+\frac{b}{2}\right)+\delta\left(x-na-\frac{b}{2}\right)\right]$

4. Qual è il passo reticolare? a

5. Scrivere l'espansione in componenti di Fourier di tale potenziale.
$U(x)=\sum_{G_m} U_{G_m}\exp(iG_m x)$ dove $G_m=\pm\frac{2\pi}{a}m$

6. Quali sono in questo caso le componenti non nulle? $\int_{-\infty}^{+\infty} g(x)\delta(x-a)dx = g(a) \Longrightarrow$

$$U_{G_m} = -\frac{V_0}{a}\left[\exp\left(-i\frac{2\pi}{a}\frac{b}{2}m\right)+\exp\left(i\frac{2\pi}{a}\frac{b}{2}m\right)\right] = -2\frac{V_0}{a}\cos\left(\frac{\pi b}{a}m\right) \neq 0 \text{ se } \frac{b}{a}\neq\frac{2n+1}{m}$$