

Fizica solidului

- examen -

24 ianuarie 2024

Durata examenului este de trei ore pentru ambele părți. Numerotați paginile cu rezolvările. Este permisă utilizarea oricărei surse bibliografice.

1 Partea I

1. (4p) ZnS cristalizează într-o structură cubică cu fețe centrate, constanta rețelei cubice fiind $a = 5.41 \text{ \AA}$. Vectorii care generează celula elementară cubică sunt

$$\begin{aligned}\vec{a}_1 &= a\hat{x} \\ \vec{a}_2 &= a\hat{y} \\ \vec{a}_3 &= a\hat{z}\end{aligned}$$

iar pozițiile atomilor în celula cubică sunt

$$\begin{aligned}\text{Zn:} & \quad [[0\ 0\ 0]], \left[\left[\frac{1}{2} \ \frac{1}{2} \ 0 \right] \right], \left[\left[\frac{1}{2} \ 0 \ \frac{1}{2} \right] \right], \left[\left[0 \ \frac{1}{2} \ \frac{1}{2} \right] \right] \\ \text{S:} & \quad \left[\left[\frac{1}{4} \ \frac{1}{4} \ \frac{1}{4} \right] \right], \left[\left[\frac{3}{4} \ \frac{3}{4} \ \frac{1}{4} \right] \right], \left[\left[\frac{3}{4} \ \frac{1}{4} \ \frac{3}{4} \right] \right], \left[\left[\frac{1}{4} \ \frac{3}{4} \ \frac{3}{4} \right] \right].\end{aligned}$$

- (a) Sunt vectorii cubici \vec{a}_i , $i = 1, 2, 3$ vectori fundamentali ai acestei structuri cristaline? Argumentați. Cum se scriu nodurile rețelei relativ la vectorii cubici?
- (b) Calculați vectorii rețelei reciproce, $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$ cu raportare la vectorii cubici \vec{a}_i , $i = 1, 2, 3$. Caracterizați rețeaua reciprocă și determinați distanțele interplanare $d_{hkl} = \frac{2\pi}{Q_{hkl}}$, cu $\vec{Q}_{hkl} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3$.
- (c) Calculați factorul de structură F_{hkl} . Există extincții sistematice? Dacă da, care este originea lor?
- (d) Se efectuează un experiment de difracție de raze X ($\lambda = 1.5406 \text{ \AA}$) pe o pudră fină de ZnS. Va apărea maximul de difracție corespunzător planelor (111)? Dacă da, la ce unghi 2θ (în grade)? Dar maximul (110)? La ce unghi?
2. (3p) Se consideră o rețea dreptunghiulară 2D cu un atom de masă M pe celula primitivă (Fig. 1). Vectorii fundamentali sunt:

$$\begin{aligned}\vec{a}_1 &= a\hat{x} \\ \vec{a}_2 &= b\hat{y}\end{aligned}$$

Matricea dinamică asociată dinamicii rețelei în aproximația armonică este:

$$D(\vec{k}) = \begin{pmatrix} 4C_{1s} \sin^2\left(\frac{\vec{k}\cdot\vec{a}_1}{2}\right) + 4C_{2\phi} \sin^2\left(\frac{\vec{k}\cdot\vec{a}_2}{2}\right) & 0 \\ 0 & 4C_{2s} \sin^2\left(\frac{\vec{k}\cdot\vec{a}_2}{2}\right) + 4C_{1\phi} \sin^2\left(\frac{\vec{k}\cdot\vec{a}_1}{2}\right) \end{pmatrix} \quad (1)$$

în care indicele s descrie deformarea de tip "stretching", iar ϕ pe cea de tip "bending".

- (a) Determinați și reprezentați grafic calitativ legile de dispersie fononice pe direcțiile $\Gamma - X$, respectiv $\Gamma - L$ din prima zonă Brillouin. Care este forma legilor de dispersie în vecinătatea centrului primei zone Brillouin, pe cele două direcții?
- (b) Ce fel de moduri fononice sunt? Argumentați.
3. (2p) Un cristal 2D prezintă două ramuri de fonon optic, cu dispersie neglijabilă, $\omega_1(\vec{k}) = \omega_{TO}$, respectiv $\omega_2(\vec{k}) = \omega_{LO}$. Evaluați contribuția acestor moduri de oscilație la capacitatea calorică a cristalului. Analizați cazul temperaturilor joase, $k_B T \ll \hbar\omega_{TO}$, $k_B T \ll \hbar\omega_{LO}$.

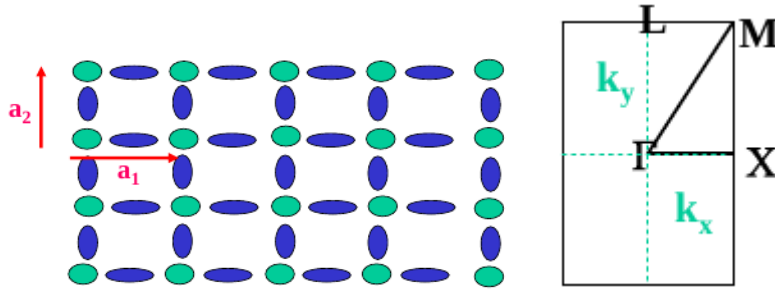


Figura 1: Cristal cu rețea dreptunghiulară 2D cu un atom în bază și prima zonă Brillouin asociată.

2 Partea a II-a

1. **(4p)** Se consideră un cristal 2D caracterizat de o rețea pătrată de parametru a :

$$\begin{aligned}\vec{a}_1 &= a\hat{x} \\ \vec{a}_2 &= a\hat{y}\end{aligned}$$

și o bază conținând un atom pe celula primitivă fără degenerare orbitală (1 orbital de tip s pe atomul izolat, ocupat de un electron). În atomul izolat energia electronului în starea s este E_s .

- (a) Descrieți structura benzii asociate (legea de dispersie) în cadrul modelului electronilor strâns legați (veți neglija integralele de acoperire $S(\vec{\Delta})$). Care sunt singularitățile van Hove din prima zonă Brillouin?
 - (b) În cele ce urmează, veți considera referința energetică la jumătatea benzii, respectiv $E_s + C = 0$ (C este integrala coulombiană care apare în modelul electronilor strâns legați). Scrieți ecuația unei curbe de energie constantă $L_\epsilon(\vec{k}) : \epsilon(\vec{k}) = E$ și reprezentați grafic curbele în prima zonă Brillouin în vecinătatea punctului $\vec{k} = 0$, respectiv pentru $E = 0$.
 - (c) Ce este acest sistem, metal sau izolator? Există o mare Fermi (aici curba $L_\epsilon(\vec{k}) : \epsilon(\vec{k}) = \epsilon_F$? Dacă răspunsul e afirmativ, reprezentați grafic regiunea din prima zonă Brillouin care include stările ocupate la $T = 0 K$.
2. **(3p)** Conducția electrică a unui semiconductor cubic nedegenerat de tip n este determinată de două mecanisme dominante de împrăștiere a electronilor din banda de conducție (cu lege de dispersie parabolică și izotropă):

- împrăștierea pe fononi acustici, cu $\tau_{ac}(\epsilon) = A_{ac}\epsilon^{-1/2}$;
- împrăștierea pe impurități ionizate, cu $\tau_{imp}(\epsilon) = A_{imp}\epsilon^{3/2}$.

A_{ac} și A_{imp} nu depind de energia electronilor în bandă. Cum cele două mecanisme sunt independente, timpul de relaxare efectiv este dat de $\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_{ac}} + \frac{1}{\tau_{imp}}$.

- (a) Evaluați mobilitatea asociată împrăștierei pe fononi acustici $\mu_{ac} = \frac{e\langle\tau_{ac}\rangle}{m_n}$, ca funcție de T și de A_{ac} .
- (b) Evaluați mobilitatea asociată împrăștierei pe impurități ionizate $\mu_{imp} = \frac{e\langle\tau_{imp}\rangle}{m_n}$, ca funcție de T și de A_{imp} . Arătați că:

$$\frac{\mu_{ac}}{\mu_{imp}} = \frac{1}{6(k_B T)^2} \frac{A_{ac}}{A_{imp}}. \quad (2)$$

- (c) În cele ce urmează veți utiliza notația $\gamma^2 = \frac{6\mu_{ac}}{\mu_{imp}}$, deci $\frac{A_{ac}}{A_{imp}} = \gamma^2(k_B T)^2$. Arătați că expresia mobilității electronice $\mu = \frac{e\langle\tau\rangle}{m_n}$ este dată de $\mu = \mu_{ac}I(\gamma)$, în care $I(\gamma)$ este o integrală care depinde de parametrul γ , pe care o veți indica fără a o evalua.
3. **(2p)** Rezistența electrică a unui conductor dintr-un material izotrop de forma unui cub de latură L este dată de expresia bine-cunoscută $R = \rho L^{-1}$, $\rho = \frac{m_n}{ne^2\langle\tau\rangle}$ fiind rezistivitatea materialului. Ce se întâmplă dacă latura L este făcută arbitrar de mică ($L \rightarrow 0$)? Descrieți argumentat, pe baza informației de care dispuneți la finalul acestui curs, limita $R(L)|_{L \rightarrow 0}$.

Se acordă **1p** din oficiu, pentru fiecare parte. Nota este media notelor obținute pentru cele două părți.

Succes!