

Fizica solidului

- examen -

27 ianuarie 2023

Durata examenului este de trei ore pentru ambele părți, sau 2 ore pentru partea a doua. Numerotați paginile cu rezolvările. Este permisă utilizarea oricărei surse bibliografice.

1 Partea I

1. **(5p)** NiO cristalizează într-o structură cubică cu fețe centrate, constanta rețelei cubice fiind $a = 4.22 \text{ \AA}$. 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

$$\begin{aligned}\text{Ni:} & \quad [[0\ 0\ 0]], \left[\left[\frac{1}{2} \ \frac{1}{2} \ 0 \right] \right], \left[\left[\frac{1}{2} \ 0 \ \frac{1}{2} \right] \right], \left[\left[0 \ \frac{1}{2} \ \frac{1}{2} \right] \right] \\ \text{O:} & \quad \left[\left[\frac{1}{2} \ 0\ 0 \right] \right], \left[\left[0 \ \frac{1}{2} \ 0 \right] \right], \left[\left[0\ 0 \ \frac{1}{2} \right] \right], \left[\left[\frac{1}{2} \ \frac{1}{2} \ \frac{1}{2} \right] \right].\end{aligned}$$

- (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 NiO. Primele trei maxime de difracție se înregistrează respectiv la $2\theta = 36.92^\circ$, 42.896° , 62.28° . Precizați (argumentat) indicii Miller corespunzători acestor maxime.
2. **(4p)** Se consideră o rețea ortorombică simplă cu un atom pe celula primitivă. Vectorii fundamentali sunt:

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

Matricea dinamică are elementele:

$$D_{\alpha\beta} = \frac{2K_{\alpha\beta}}{M} \sum_{\vec{\Delta}} \left(\sin \frac{\vec{k} \cdot \vec{\Delta}}{2} \right)^2 \frac{\Delta_\alpha \Delta_\beta}{\Delta} \quad (1)$$

cu $\alpha, \beta = x, y, z$, $\vec{\Delta}$ fiind vectorii care descriu vecinii de ordin I ai unui atom din structură. Δ_α este componenta α a vectorului $\vec{\Delta}$.

- (a) Să se determine legile de dispersie fononice ale acestei structuri. Care este forma legilor de dispersie în vecinătatea centrului primei zone Brillouin?
- (b) Ce fel de moduri fononice sunt? Argumentați.

2 Partea a II-a

1. **(3p)*¹** Se consideră un cristal cu structură tetragonală simplă descrisă de:

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

și un atom pe celula primitivă fără degenerare orbitală (1 orbital de tip s pe atomul izolat). 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 zona Brillouin?
- (b) Descrieți structura benzii în vecinătatea centrului primei zone Brillouin și determinați tensorul masei efective.
2. **(3p)** Calculați densitatea de purtători liberi intrinsecă în Ge la 300 K. Masa efectivă a densității de stări în banda de valență este $m_p = 0.362m_0$, iar în banda de conducție $m_n = 0.553m_0$. Evaluați intervalul de temperatură corespunzător regiunii de epuizare a impurităților, dacă Ge este dopat cu donori cu $N_d = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ și $\epsilon_c - \epsilon_d = 0.02 \text{ eV}$. Se cunosc constanta Planck $h = 6.626 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s} = 4.14 \cdot 10^{-15} \text{ eV}\cdot\text{s}$, masa electronului liber $m_0 = 9.1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$, lărgimea benzii interzise $\epsilon_g = 0.67 \text{ eV}$ și constanta Boltzmann $k_B = 1.38 \cdot 10^{-23} \text{ J/K} = 8.62 \cdot 10^{-5} \text{ eV/K}$
3. **(3p)** Se consideră un gaz electronic 2D. Legea de dispersie este

$$\epsilon(\vec{k}) = \epsilon_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad \vec{k} = (k_x, k_y). \quad (2)$$

Determinați expresia densității de stări în energie $g_\sigma(\epsilon) = \frac{1}{(2\pi)^2} \oint_{L(\epsilon)} \frac{dl}{|\nabla_{\vec{k}} \epsilon|}$ ($L(\epsilon)$ este curba de energie constantă în spațiul reciproc definită de $\epsilon(\vec{k}) = \epsilon$) și evaluați dependența de temperatură și de nivelul Fermi a densității de electroni $n = \sum_\sigma \int_{\epsilon_0}^\infty f_0(\epsilon) g_\sigma(\epsilon) d\epsilon$ ($f_0(\epsilon)$ este funcția de distribuție Fermi-Dirac).

4. **(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 împrăștierii 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 împrăștierii pe impurități ionizate $\mu_{imp} = \frac{e\langle\tau_{imp}\rangle}{m_n}$, ca funcție de T și de A_{imp} . Arătați că:

$$\frac{\mu_{ac}}{\mu_{imp}} = \frac{1}{6(k_B T)^2} \frac{A_{ac}}{A_{imp}}. \quad (3)$$

- (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.

Se acordă **1p** din oficiu, pentru fiecare parte.

Succes!

¹Veți trata, la alegere, numai unul dintre subiectele marcate cu "*" în această parte