

# Fizica solidului

- examen -

29 ianuarie 2025

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

## 1 Partea I

1. **(5p)** CdS cristalizează într-o structură hexagonală, constantele rețelei fiind  $a = 4.13 \text{ \AA}$  și  $c = 6.703 \text{ \AA}$ . Vectorii fundamentali sunt

$$\begin{aligned}\vec{a}_1 &= a\hat{x} \\ \vec{a}_2 &= \frac{a}{2}(-\hat{x} + \sqrt{3}\hat{y}) \\ \vec{a}_3 &= c\hat{z}\end{aligned}$$

iar pozițiile atomilor în celula primitivă sunt

$$\begin{aligned}\text{Cd:} & \quad [[0\ 0\ 0]], \quad \left[ \left[ \begin{array}{ccc} 2 & 1 & 1 \\ 3 & 3 & 2 \end{array} \right] \right] \\ \text{S:} & \quad [[0\ 0\ u]], \quad \left[ \left[ \begin{array}{ccc} 2 & 1 & 1 \\ 3 & 3 & 2 \end{array} \right] + u \right],\end{aligned}$$

cu  $u = 0.38$ .

- (a) Caracterizați rețeaua reciprocă și determinați distanțele interplanare  $d_{hkl} = \frac{2\pi}{Q_{hkl}}$ , cu  $\vec{Q}_{hkl} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3$ .
- (b) Calculați factorul de structură  $F_{hkl}$ . Există extincții sistematice? Dacă da, care este originea lor?
- (c) Se efectuează un experiment de difracție de raze X ( $\lambda = 1.5406 \text{ \AA}$ ) pe o pudră fină de CdS. Va apărea maximul de difracție corespunzător planelor (111)? Dacă da, la ce unghi  $2\theta$  (în grade)? Dar maximul (001)? La ce unghi?
2. **(4p)** Se consideră o rețea tetragonală simplă cu un atom pe celula primitivă. Vectorii fundamentali sunt:

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

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.  $\Delta_\alpha$  este componenta  $\alpha$  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. (5p) Se consideră un cristal 3D caracterizat de o rețea tetragonală de parametri  $a$  și  $c$ :

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

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  $E_s$ .

- 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?
  - Scriți ecuația unei suprafețe de energie constantă  $S_\epsilon(\vec{k}) : \epsilon(\vec{k}) = E$  în vecinătatea punctului  $\vec{k} = 0$  și determinați tensorul masei efective.
  - Ce este acest sistem, metal sau izolator?
2. (4p) Un cristal de Ge este dopat cu B, care introduce nivele acceptoare în banda interzisă la  $E_B = E_v + 0.011$  eV. Densitatea atomilor de B este  $N_B = 2 \cdot 10^{15}$  cm<sup>-3</sup>, iar gradul de degenerare a nivelelor acceptoare este  $g_B = 2$ . Determinați intervalul de temperatură în care densitatea golurilor este constantă și egală cu densitatea centrilor acceptori. Calculați limitele acestui interval, știind că  $\epsilon_g = 0.67$  eV, iar densitatea efectivă de stări în banda de valență este  $N_v \approx 5 \cdot 10^{18}$  cm<sup>-3</sup>. Se dă  $k_B = 1.38 \cdot 10^{-23}$  J/K =  $8.617 \cdot 10^{-5}$  eV/K.

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

**Succes!**