Esonero di Materia Condensata del 22 Novembre 2009

Paolo Calvani – Mario Capizzi

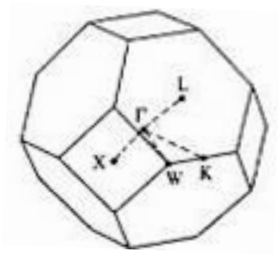
Esercizio 1

In un reticolo cubico a facce centrate con lato del cubo a = 2,8 Å, una banda di energia ha la forma

$$\varepsilon(\bar{k}) = \varepsilon_0 - \beta - 4\gamma\left[\cos(k_x \frac{a}{2})\cos(k_y \frac{a}{2}) + \cos(k_x \frac{a}{2})\cos(k_z \frac{a}{2}) + \cos(k_y \frac{a}{2})\cos(k_z \frac{a}{2})\right]$$

dove γ = 0,56 eV.

1) Valutare l'espressione della velocità di gruppo dell'elettrone $\bar{v}_g(\bar{k},\bar{r})$ per $\boldsymbol{k}$ che varia lungo la direzione $\frac{2\pi}{a}(\mu,0,0)$ con $\mu \in [0,1]$. Determinare $\bar{v}_g$ nel punto $X \equiv \frac{2\pi}{a}(1,0,0)$ della prima ZB rappresentata nella Figura e giustificare il valore trovato.



2) Trovare la massa efficace m^*_e con cui si muove un elettrone nella direzione (1, 0, 0) quando un campo elettrico e' applicato nella stessa direzione, e il valore di k per cui tale massa diverge. Calcolare m^*_e nel punto $\Gamma \equiv (0,0,0)$.
3) Valutare l'espressione della velocità di gruppo dell'elettrone $\bar{v}_g$ per $\boldsymbol{k}$ che varia lungo la direzione $\frac{2\pi}{a}(\mu,\mu,\mu)$ con $\mu \in [0,1]$. Determinare $\bar{v}_g$ nel punto $L \equiv \frac{2\pi}{a}(0.5,\ 0.5,\ 0.5)$ della ZB e giustificare il valore trovato basandosi nuovamente sulla Figura.
4) Trovare per quale valore di k *interno* all'intervallo del punto 3), la proiezione di $\bar{v}_g$ lungo la direzione (1, 1, 1) è minima.

Esercizio 2

In un semiconduttore intrinseco il numero degli elettroni di conduzione a 300 K è

$$n = N_c \exp(\mu - E_g)/k_B T$$

dove $E_g = 0{,}5\,\text{eV}$, $N_c = 10^{19}/\text{m}^3$, e il potenziale chimico μ coincide con l'energia di Fermi a T=0. I portatori dei due segni, elettroni in banda di conduzione e lacune in banda di valenza, hanno la stessa massa efficace. Inoltre le misure di trasporto forniscono a 300 K una conducibilità elettrica $\sigma = 1.5\times10^{-3}\ \Omega^{-1}\text{m}^{-1}$ e una costante di Hall R_H che, nel SI, vale

$$R_H = \frac{1}{e}\frac{p\mu^2{}_b - n\mu^2{}_e}{(p\mu_b + n\mu_e)^2} = 2\times10^3\ \text{m}^3/\text{C}$$

1) Si ricavino le mobilità delle buche e degli elettroni μ_b e μ_e.
2) Sapendo che la banda di conduzione ha la forma

$$E(k) = \frac{10\hbar^2 k^2}{m}$$

dove $m = 9{,}1\times10^{-31}$ kg è la massa dell'elettrone libero, si trovino i tempi medi di scattering τ_b e τ_e.

[1 eV = 1,6×10^{-12} erg; 1 eV/k_B = 11600 K; $\hbar$ = 1,05x10^{-27} erg s; e = 1,6×10^{-19} C]

Esercizio 1-Soluzione

1) v_g e' data da

$$\bar{v}_g(\bar{r};\bar{k}) = \frac{1}{\hbar}\left(\frac{\partial\varepsilon}{\partial k_x}\hat{x} + \frac{\partial\varepsilon}{\partial k_x}\hat{y} + \frac{\partial\varepsilon}{\partial k_x}\hat{z}\right) = \frac{2a\gamma}{\hbar}\left\{\sin\left(k_x\frac{a}{2}\right)\left[\cos\left(k_y\frac{a}{2}\right) + \cos\left(k_z\frac{a}{2}\right)\right]\hat{x}\right\} +$$

$$+ 2a\gamma\left\{\sin\left(k_y\frac{a}{2}\right)\left[\cos\left(k_x\frac{a}{2}\right) + \cos\left(k_z\frac{a}{2}\right)\right]\hat{y} + \sin\left(k_z\frac{a}{2}\right)\left[\cos\left(k_x\frac{a}{2}\right) + \cos\left(k_y\frac{a}{2}\right)\right]\hat{z}\right\}$$

Tale velocità, valutata per ***k*** che varia lungo la direzione (1,0,0), si riduce alla sua proiezione lungo questa direzione

$$\bar{v}_g\left(\bar{r};\bar{k} = \frac{2\pi}{a}(1{,}0{,}0)\right) = \frac{4a\gamma}{\hbar}\sin\left(k_x\frac{a}{2}\right)\hat{x} = \frac{4a\gamma}{\hbar}\sin(\mu\pi)\hat{x} \qquad \mu\in[0{,}1]$$

ove $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ sono dei versori nello spazio reale, e per μ=1 $\bar{v}_g = 0$. Infatti il punto X si trova al bordo della prima ZB e la velocità di gruppo deve annullarsi in quanto per tale valore di ***k*** vi sono due stati degeneri in energia separati da un vettore del reticolo reciproco, per cui l'elettrone è rappresentato da un'onda stazionaria.

Si noti che per la direzione (1,0,0) ci si poteva ridurre a un caso "unidimensionale" scrivendo energia e velocità nella direzione (μ, 0, 0) in funzione del solo parametro μ, ottenendo

$$\varepsilon(\bar{k}) = \varepsilon_0 - \beta - 4\gamma\left[\cos\left(\frac{2\pi}{a}\mu\frac{a}{2}\right) + \cos\left(\frac{2\pi}{a}\mu\frac{a}{2}\right) + 1\right] = \varepsilon_0 - \beta - 4\gamma\left[1 + 2\cos(\mu\pi)\right]$$

$$\frac{\partial\varepsilon}{\partial k} = \frac{\partial\varepsilon}{\partial\mu}\frac{\partial\mu}{\partial k} = 8\gamma\pi\sin(\mu\pi)\cdot\frac{a}{2\pi}; \qquad \mathrm{v}_g = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial\varepsilon}{\partial k} = \frac{4\gamma a}{\hbar}\sin(\mu\pi)\hat{x}$$

2) La massa efficace con cui si muove un elettrone nella direzione (1, 0, 0) per un campo elettrico applicato nella stessa direzione è data da

$$m^*_{xx} = \hbar^2\left(\frac{\partial^2\varepsilon}{\partial k_x^2}\right)^{-1} = \hbar^2\left(\frac{\partial\hbar v_{gx}}{\partial k_x}\right)^{-1} = \hbar^2\left[4a\gamma\frac{a}{2}\cos\left(k_x\frac{a}{2}\right)\right]^{-1} = \frac{\hbar^2}{2a^2\gamma\cos\left(k_x\frac{a}{2}\right)} = \frac{\hbar^2}{2a^2\gamma\cos(\mu\pi)}$$

$$m^*_{xx}(\Gamma) = \hbar^2\left(\frac{\partial^2\varepsilon}{\partial k^2}\right)^{-1}\Bigg|_{k=0} = \frac{\hbar^2}{2a^2\gamma} = \frac{(1{,}05\times10^{-27})^2}{2\times(2{,}8\times10^{-8})^2\times0{,}56\times1{,}6\times10^{-12}} = 7{,}8\times10^{-28}\ \mathrm{g} = 0{,}86\ \mathrm{m}_0$$

La massa efficace diverge per cos(*ka*/2)=cos(μπ)=0,ossia per *k*=π/*a* ovvero μ=0,5.

Se si fosse chiesto invece il valore del tensore massa efficace lungo la direzione (1, 0, 0), si sarebbe dovuto ricavare tale tensore che, valutato per ***k*** variabile lungo la direzione (1,0,0), avrebbe dato

$$\overline{\overline{M}}^{-1}(\mu)=\frac{1}{\hbar^2}\left|\frac{\partial^2\varepsilon}{\partial k_i\partial k_j}\right|_{100}=\frac{-\gamma a^2}{\hbar^2}\begin{pmatrix}-2\cos(\mu\pi) & 0 & 0\\ 0 & -\cos(\mu\pi)-1 & 0\\ 0 & 0 & -\cos(\mu\pi)-1\end{pmatrix}$$ e per $\boldsymbol{k}$=0

$$\overline{\overline{M}}^{-1}(\bar{k}=0)=\frac{2\gamma a^2}{\hbar^2}\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$ e pertanto

$$\overline{\overline{M}}(\bar{k}=0)=\frac{\hbar^2}{2\gamma a^2}\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}=7{,}8\times10^{-28}\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}g$$

3) La velocita' di gruppo lungo la direzione (1,1,1) - di coseni direttori (1/√3, 1/√3, 1/√3) - e' data da

$$\bar{v}_g\left(\bar{r};\bar{k}=\frac{2\pi}{a}(1{,}1{,}1)\right)=\frac{4a\gamma}{\hbar}\sin(\mu\pi)\cos(\mu\pi)(\hat{x}+\hat{y}+\hat{z})=\frac{2a\gamma}{\hbar}\sin(2\mu\pi)(\hat{x}+\hat{y}+\hat{z})\qquad \mu\in[0,1]$$

4) La sua proiezione lungo l'asse (1,1,1) e' data da

$$\bar{v}_g\bullet\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\hat{x}+\frac{1}{\sqrt{3}}\hat{y}+\frac{1}{\sqrt{3}}\hat{z}\right)=\frac{1}{\hbar\sqrt{3}}\left(\frac{\partial\varepsilon}{\partial k_x}+\frac{\partial\varepsilon}{\partial k_x}+\frac{\partial\varepsilon}{\partial k_x}\right)=\frac{2a\gamma}{\hbar\sqrt{3}}\left\{\sin\left(k_x\frac{a}{2}\right)\left[\cos\left(k_y\frac{a}{2}\right)+\cos\left(k_z\frac{a}{2}\right)\right]\right\}+$$

$$+\frac{2a\gamma}{\sqrt{3}}\left\{\sin\left(k_y\frac{a}{2}\right)\left[\cos\left(k_x\frac{a}{2}\right)+\cos\left(k_z\frac{a}{2}\right)\right]+\sin\left(k_z\frac{a}{2}\right)\left[\cos\left(k_x\frac{a}{2}\right)+\cos\left(k_y\frac{a}{2}\right)\right]\right\}=$$

$$\frac{4\sqrt{3}a\gamma}{\hbar}\sin(\mu\pi)\cos(\mu\pi)=\frac{2\sqrt{3}a\gamma}{\hbar}\sin(2\mu\pi)$$

Per μ=0,5 $\bar{v}_g$ = 0. Infatti anche il punto L si trova al bordo della prima ZB e la velocità di gruppo, calcolata lungo la perpendicolare alla ZB, deve annullarsi perché, per tale valore di *k*, l'elettrone è rappresentato da un'onda stazionaria.

In modo piu' diretto si poteva anche dire che la proiezione della velocità di gruppo lungo la direzione (1,1,1) si ottiene moltiplicando per $\sqrt{3}$ una qualunque delle componenti:

$$v_g=\frac{1}{\hbar}\frac{\partial\varepsilon}{\partial k_x}\sqrt{3}=\frac{2\sqrt{3}}{\hbar}a\gamma\left\{\sin\left(k_x\frac{a}{2}\right)\left[\cos\left(k_y\frac{a}{2}\right)+\cos\left(k_z\frac{a}{2}\right)\right]\right\}=$$

$$\frac{4}{\hbar}\sqrt{3}a\gamma\sin(\mu\pi)\cos(\mu\pi)=\frac{2}{\hbar}\sqrt{3}a\gamma\sin(2\mu\pi)$$

Il minimo della proiezione della velocita' lungo la (1,1,1) all'interno dell'intervallo dato [0,1] si ha per

$$\sin(2\pi\mu)=-1$$

ossia per μ=3/4 ovvero $k_x = k_y = k_z = 3\pi/2a$

Esercizio 2 - Soluzione

1) Il semiconduttore è intrinseco e le masse efficaci sono uguali. Dunque

$$n = p = n_i \quad \text{e} \quad \mu = E_g / 2 .$$

Perciò

$$n_i = n = p = N_c \exp(-E_g / 2kT) = 10^{19} \exp(-0{,}5 \times 11600 / 600) = 6{,}34 \times 10^{14} \ /\mathrm{m}^3$$

Inoltre

$$\sigma = pe\mu_b + ne\mu_e = n_i e(\mu_b + \mu_e)$$

$$R_H = \frac{1}{e}\frac{p\mu^2{}_b - n\mu^2{}_e}{(p\mu_b + n\mu_e)^2} = \frac{1}{n_i e}\frac{(\mu_b - \mu_e)}{(\mu_b + \mu_e)}$$

Quindi

$$\frac{\sigma}{n_i e} = \mu_b + \mu_e$$

$$R_H n_i e = \frac{\mu_b - \mu_e}{\mu_b + \mu_e}$$

$$\frac{\sigma}{n_i e} = \mu_b + \mu_e$$

$$R_H n_i e = \frac{\mu_b - \mu_e}{\sigma / n_i e} \qquad R_H = \frac{\mu_b - \mu_e}{\sigma}$$

$$\mu_b = \frac{\sigma}{2}\left(\frac{1}{n_i e} + R_H\right) = 7{,}5 \times 10^{-4}\left(\frac{1}{6{,}34 \times 10^{14} \times 1{,}6 \times 10^{-19}} + 2 \times 10^{3}\right) = 7{,}5 \times 10^{-4} \times (9860 + 2000) = 1{,}186\, m^2 V^{-1} s^{-1}$$

$$\mu_e = \frac{\sigma}{2}\left(\frac{1}{n_i e} - R_H\right) = 7{,}5 \times 10^{-4}\left(\frac{1}{6{,}34 \times 10^{14} \times 1{,}6 \times 10^{-19}} - 2 \times 10^{3}\right) = 7{,}5 \times 10^{-4} \times (9860 - 2000) = 0{,}7860\ m^2 V^{-1} s^{-1}$$

2)

$$m^*{}_b = m^*{}_e = \frac{\hbar^2}{\dfrac{\partial^2 E}{\partial k^2}} = \frac{m}{20} = 0{,}05 \times 9{,}1 \times 10^{-31} = 0{,}455 \times 10^{-31}\ \mathrm{kg}$$

$$\tau_b = \frac{\mu_b m^*}{e} = \frac{1{,}186 \times 0{,}455 \times 10^{-31}}{1{,}6 \times 10^{-19}} = 3{,}37 \times 10^{-13} s$$

$$\tau_e = \frac{\mu_e m^*}{e} = \frac{0{,}786 \times 0{,}455 \times 10^{-31}}{1{,}6 \times 10^{-19}} = 2{,}23 \times 10^{-13} s$$