

Esonero di Materia Condensata del 28 Gennaio 2009

Proff. Paolo Calvani e Mario Capizzi

Risolvere due esercizi a scelta fra i tre proposti.

1° Esercizio

Una catena lineare è fatta di $N = 10^{21}$ atomi di massa $M_1 = 16$ u. a., alternati a N atomi di massa $M_2 = 8$ u. a. Lungo la catena si propagano soltanto onde elastiche longitudinali le cui frequenze $\omega(K)$ sono soluzioni dell'equazione

$$M_1 M_2 \omega^4 - 2C(M_1 + M_2)\omega^2 + 2C^2(1 - \cos Ka) = 0 \quad (1)$$

dove $C = 2000$ dyne/cm è la costante di forza e a è il passo (distanza fra atomi uguali primi vicini).

- Trovare le frequenze di propagazione ω_1 e ω_2 al bordo della prima zona di Brillouin, specificando quale appartiene alla branca ottica e quale alla branca acustica.
- Assumendo un modello di Einstein con i soli due modi efficaci ω_1 e ω_2 , di cui al punto a), calcolare l'energia vibrazionale interna della catena a 100 K. Si ricorda che il numero di occupazione medio dei livelli vibrazionali è

$$\langle n \rangle = 1 / [\exp(\hbar\omega/k_B T) - 1]$$

- Assumendo come soluzione approssimata della (1) per K piccoli

$$\omega^2 = \frac{C/2}{M_1 + M_2} K^2 a^2$$

calcolare la temperatura di Debye della catena assumendo che la densità degli stati per una singola branca sia

$$D(\omega)d\omega = \frac{L}{\pi v_s} d\omega$$

dove L è la lunghezza della catena e v_s la velocità del suono.

Facoltativo. Valutare K_D e commentarne il valore.

2° Esercizio

Si consideri un semiconduttore drogato con soli donatori. La costante di Hall $R_H = -1/nq_c$ diminuisce in modulo di 10 volte fra 10 e 20 K. Quando il campione è illuminato (con radiazione infrarossa) tra 10 e 100 cm^{-1} , il coefficiente di assorbimento a $T=0$ presenta una serie di righe seguita da un continuo.

- Trovare la frequenza della riga più bassa in energia;
- Indicare la frequenza alla quale inizia il continuo.
- Indicare per quale indice minimo di livello di stato eccitato, n_{\min} , si inizia ad avere la formazione di una banda di impurezza se la concentrazione di impurezze è $N_i = 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ e la costante dielettrica relativa del semiconduttore è pari a 12.

Si assuma che

$$n(T) \propto T^{3/2} e^{-\varepsilon_d / 2k_B T}$$

ove ε_d e' l'energia di ionizzazione dell'elettrone legato alla impurezza.

$$E_n = Ry \frac{m^*}{m_0} \left(\frac{1}{\varepsilon_r} \right)^2 \frac{1}{n^2}, \quad a_n = n^2 a_1 = n^2 \frac{m_0}{m^*} \varepsilon_r a_B$$

Tenere conto di tutte le dipendenze dalla temperatura e trascurare le deviazioni da un potenziale sfericamente simmetrico.

3° Esercizio

Si consideri un ipotetico reticolo quadrato nel piano x - y , con distanza interatomica $a=0.2$ nm e un atomo monovalente di orbitale p_y su ogni sito.

Utilizzando il metodo del legame forte (tight binding):

- scrivere l'espressione esplicita dell'energia $\varepsilon(\mathbf{k})$ conoscendo il valore degli integrali di sovrapposizione γ ($|\gamma_1| = 1.0$ eV e $|\gamma_2| = 0.5$ eV : ci si limita a considerare a considerare la interazione con i soli primi vicini);
- scrivere la massa efficace nelle direzioni k_x e k_y nell'intorno di $\mathbf{k} = 0$ e valutarne il valore in $\mathbf{k} = 0$;
- valutare la larghezza ΔE di banda;
- indicare cosa sarebbe cambiato nel caso l'orbitale su ogni atomo fosse stato di tipo p_x o p_z .

Facoltativo: disegnare schematicamente l'andamento delle bande di energia nelle direzioni k_x e k_y .

Nella ipotesi fatte

$$\varepsilon(\bar{k}) = \varepsilon_{p_y} - \beta - \sum_{\bar{R} \neq 0} \gamma(\bar{R}) e^{i\bar{k} \cdot \bar{R}}$$

$$\gamma(\bar{R}) = -\int \psi_{p_y}^*(\bar{r}) \Delta V(\bar{r}) \psi_{p_y}(\bar{r} - \bar{R}) d\bar{r}$$

Fattori di conversione relativi ai tre esercizi dati.

$$1 \text{ u.m.a.} = 1.67 \times 10^{-24} \text{ g};$$

$$k_B = 1,38 \times 10^{-16} \text{ erg/K};$$

$$\hbar = 1,05 \times 10^{-27} \text{ erg}\cdot\text{s};$$

$$1 \text{ eV} = 1.6 \times 10^{-12} \text{ erg} = 11605 \text{ K} = 8066 \text{ cm}^{-1} = 2.42 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$$

$$Ry = 13.6 \text{ eV};$$

$$a_B = 0.05 \text{ nm}$$

Soluzione 1° esercizio (4+4+7+1)

a) Per $Ka = \pm\pi$ la (1) diventa una eq. di 2° grado in ω^2 che dà come soluzioni (vedi appunti):

$$\omega_1 = \sqrt{2C/M_1} = \sqrt{\frac{4000}{16 \times 1.67 \times 10^{-24}}} = 1.22 \cdot 10^{13} \text{ rad/s} = 1.22 \cdot 10^{13} \times 1.05 \cdot 10^{-27} / 1.38 \cdot 10^{-16} \text{ K} = 93 \text{ K}$$

$$\omega_2 = \sqrt{2C/M_2} = \sqrt{\frac{4000}{8 \times 1.67 \times 10^{-24}}} = 1.73 \cdot 10^{13} \text{ rad/s} = 1.73 \cdot 10^{13} \times 1.05 \cdot 10^{-27} / 1.38 \cdot 10^{-16} \text{ K} = 132 \text{ K}$$

Poiché $M_1 > M_2$, ω_1 è acustica e ω_2 ottica.

b) Poiché vi sono 2 atomi per cella, i modi di vibrazione ammissibili sono $2N$, per cui si hanno N oscillatori di Einstein a ciascuna frequenza. Nel calcolo della energia vibrazionale interna si può includere, o meno, l'energia di punto zero (a seconda di come è stato definito durante il corso un oscillatore di Einstein, classico o quantistico):

$$U = \sum_{K_s} \hbar \omega_s \left[n_s(\bar{K}) + \frac{1}{2} \right] = N \hbar \omega_1 \left[\langle n_1 \rangle + \frac{1}{2} \right] + N \hbar \omega_2 \left[\langle n_2 \rangle + \frac{1}{2} \right] =$$

$$N \hbar \left\{ \omega_1 / [\exp(\hbar \omega_1 / k_B T) - 1] + \omega_2 / [\exp(\hbar \omega_2 / k_B T) - 1] \right\} + N \hbar \left[\frac{\omega_1 + \omega_2}{2} \right] =$$

$$= 10^{21} \times 1.05 \cdot 10^{-27} \left(\frac{1.22 \cdot 10^{13}}{\exp(93/100) - 1} + \frac{1.73 \cdot 10^{13}}{\exp(132/100) - 1} \right) + 10^{21} \times 1.05 \cdot 10^{-27} \left(\frac{1.22 \cdot 10^{13} + 1.73 \cdot 10^{13}}{2} \right) =$$

$$= 1.05 \cdot 10^{-6} \times 10^{13} \cdot (0.80 + 0.63) + 1.05 \cdot 10^{-6} \times 10^{13} (1.47) = 3.04 \times 10^7 \text{ erg} \quad (\text{ovvero } 1.54 \times 10^7 \text{ erg})$$

c) Infine, se $2N$ sono i modi di vibrazione ammissibili per il sistema

$$2N = \int_0^{\omega_D} \frac{L}{\pi v_s} d\omega = \frac{L}{\pi v_s} \omega_D$$

$$\theta_D = \frac{\hbar \omega_D}{k_B} = \frac{2\pi \hbar N v_s}{L k_B} = \frac{2\pi \hbar v_s}{a k_B} = \frac{2\pi \hbar (d\omega / dK)}{a k_B} = \frac{2\pi \hbar}{k_B} \sqrt{\frac{C/2}{M_1 + M_2}} =$$

$$\frac{2\pi \times 1.05 \times 10^{-27}}{1.38 \times 10^{-16}} \sqrt{\frac{2000/2}{24 \times 1.67 \times 10^{-24}}} = 4.78 \cdot 10^{-11} \times 4.99 \cdot 10^{12} = 239 \text{ K}$$

$$d) K_D = \frac{K_B \theta_D}{\hbar v_s} = \frac{K_B \theta_D}{\hbar \sqrt{\frac{C/2}{M_1 + M_2}} a} = \frac{1.38 \cdot 10^{-16} \times 239}{1.05 \cdot 10^{-27} \times 4.99 \cdot 10^{12}} \times \frac{1}{a} = \frac{6.3}{a} \cong 2 \frac{\pi}{a}$$

ossia si deve estendere l'integrale fino a tutta la seconda zona di Brillouin per tenere conto della presenza di due branche fononiche, dovute alla presenza di 2 atomi per cella e $2N$ modi.

Soluzione 2° esercizio (4+2+9)

a)
$$R_H(T) = -\frac{1}{n(T)ec}$$

$$\frac{R(10)}{R(20)} = 10 = \frac{n(20)}{n(10)} = \left(\frac{20}{10}\right)^{3/2} e^{-\frac{\epsilon_d}{2k_B}\left(\frac{1}{20}-\frac{1}{10}\right)} = 2^{3/2} e^{-\frac{\epsilon_d}{2k_B}\left(-\frac{1}{20}\right)} = 2^{3/2} e^{\frac{\epsilon_d}{40k_B}}$$

$$\frac{\epsilon_d}{40k_B} = \ln \frac{5}{2^{1/2}} \quad \frac{\epsilon_d}{k_B} = 40 \ln \frac{5}{2^{1/2}} = 40 \times \ln 3.53 = 50.5 \text{ K} = 4.35 \text{ meV} = 35.1 \text{ cm}^{-1}$$

Nell'infrarosso fra 0 e 100 cm^{-1} si osservano le righe di assorbimento dal livello fondamentale $1s$ del donatore a tutti i livelli eccitati np , di energia

$$E_n = -\frac{\epsilon_d}{n^2}$$

Si osserva pertanto un pettine di transizioni, con separazione decrescente in energia, che vanno a confluire in un continuo alla energia di ionizzazione del donatore.

La prima riga si trova a

$$-\epsilon_d \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{1^2} \right) = \epsilon_d \frac{3}{4} = 26.3 \text{ cm}^{-1}$$

b) Il continuo comincia a 35.1 cm^{-1} .

c)
$$E_n = Ry \frac{m^*}{m_0} \left(\frac{1}{\epsilon_r} \right)^2 \frac{1}{n^2}, \quad a_n = n^2 a_1 = n^2 \frac{m_0}{m^*} \epsilon_r a_B$$

$$E_n a_n = Ry \frac{m^*}{m_0} \left(\frac{1}{\epsilon_r} \right)^2 \frac{1}{n^2} \times n^2 \frac{m_0}{m^*} \epsilon_r a_B = \frac{1}{\epsilon_r} \cdot Ry \cdot a_B$$

$$a_1 = \frac{1}{12} 13.6 (eV) \cdot 0.05 (nm) / 4.35 \cdot 10^{-3} (eV) = 13 \text{ nm}$$

Si ha formazione di bande quando la distanza media fra impurezze e' confrontabile con il raggio di Bohr del livello eccitato.

$$\left(\frac{1}{N_i} \right)^{1/3} = a_n = n^2 a_1$$

$$n_{\min} = \left(\frac{1}{N_i} \right)^{1/6} \left(\frac{1}{a_1} \right)^{1/2} = \left(\frac{1}{10^{12}} \right)^{1/6} \left(\frac{1}{13 \cdot 10^{-7}} \right)^{1/2} = 10^{-2} \cdot 877 \approx 9$$

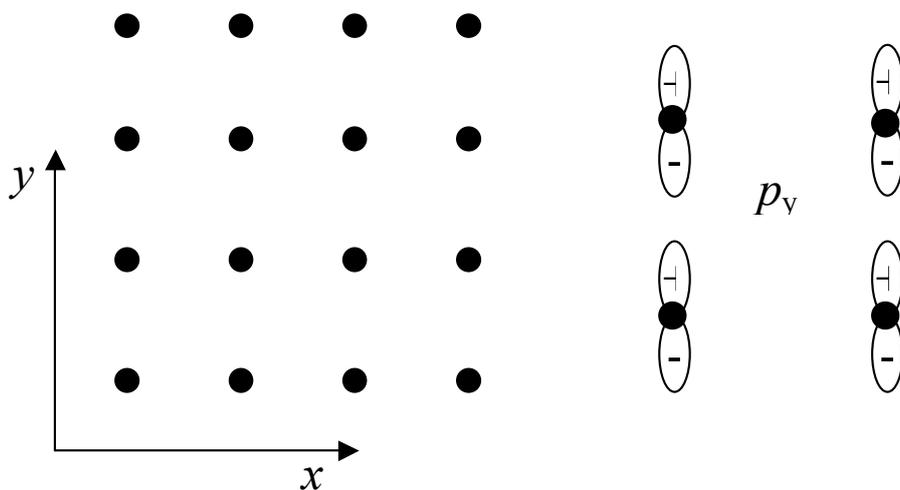
Se per definire la transizione di Mott si fosse utilizzato il criterio alternativo

$$N_i = \frac{4}{3} \pi a_n^3 = \frac{4}{3} \pi (n^2 a_1)^3 = \frac{4}{3} \pi n^6 a_1^3$$

si sarebbe ottenuto invece

$$n_{\min} = \left(\frac{1}{N_i} \right)^{1/6} \left(\frac{1}{a_1} \right)^{1/2} \left(\frac{3}{4\pi} \right)^{1/6} = 10^{-2} \cdot 877 \times 0.79 = 6.9$$

Soluzione 3° esercizio (5+5+3+2+1)



- a) La funzione p_y ha due lobi lungo la direzione y , uno positivo e uno negativo. Pertanto si hanno due diversi valori di γ , a seconda che si considerino valori di \mathbf{R} in direzione x o y , con γ_x positivo e γ_y negativo in quanto $\gamma(\bar{R}) = -\int \psi_{p_y}^*(\bar{r}) \Delta V(\bar{r}) \psi_{p_y}(\bar{r} - \bar{R}) d\bar{r}$ e ΔV e' negativo, perche' il cristallo possa essere stabile. Inoltre, data la forma delle funzioni p_y , allungate lungo la direzione y , $|\gamma_y| > |\gamma_x|$. Pertanto $\gamma_x = \gamma_2 = 0.5$ eV e $\gamma_y = \gamma_1 = -1$ eV.

$$\varepsilon(\bar{k}) = \varepsilon_{p_y} - \beta - 2\gamma_x \cos k_x a - 2\gamma_y \cos k_y a = \varepsilon_{p_y} - \beta - 2\gamma_2 \cos k_x a - 2\gamma_1 \cos k_y a$$

b)

$$m_{xx}^* = \hbar^2 \left[\frac{\partial \varepsilon(\bar{k})}{\partial k_x^2} \right]^{-1} = \frac{\hbar^2}{2\gamma_x a^2 \cos k_x a} \cong \frac{\hbar^2}{2\gamma_x a^2 (1 - k_x^2 a^2 / 2)} > 0$$

$$m_{yy}^* = \hbar^2 \left[\frac{\partial \varepsilon(\bar{k})}{\partial k_y^2} \right]^{-1} = \frac{\hbar^2}{2\gamma_y a^2 \cos k_y a} \cong \frac{\hbar^2}{2\gamma_y a^2 (1 - k_y^2 a^2 / 2)} < 0$$

$$m_{xx}^*(\bar{k} = 0) = \frac{\hbar^2}{2\gamma_x a^2} = \frac{(1.05 \cdot 10^{-27})^2}{2 \times 0.5 \times 1.6 \cdot 10^{-12} \times (0.2 \cdot 10^{-7})^2} = 17.2 \cdot 10^{-28} \text{ g} = 1.89 m_0$$

$$m_{yy}^*(\bar{k} = 0) = \frac{\hbar^2}{2\gamma_y a^2} = \frac{(1.05 \cdot 10^{-27})^2}{2 \times -1 \times 1.6 \cdot 10^{-12} \times (0.2 \cdot 10^{-7})^2} = -8.6 \cdot 10^{-28} \text{ g} = -0.94 m_0$$

c) La larghezza di banda e' pertanto

$$\Delta E = 4\gamma_x - 4\gamma_y = 4 \cdot 0.5 - 4 \cdot (-1) = 6 \text{ eV}$$

e) Se l'orbitale fosse stato un p_x , si sarebbero ottenute le stesse equazioni pur di scambiare il ruolo dell'asse x con quello dell'asse y . Se l'orbitale fosse invece stato un p_z , il valore di entrambi gli integrali di trasferimento sarebbe positivo (e uguale per i due integrali lungo gli assi x e y).

