Prova scritta di Materia Condensata del 10 Settembre 2014

Prof. Paolo Calvani – Prof. Mario Capizzi

Esercizio 1

Un ipotetico semiconduttore intrinseco ha una struttura cubica semplice, di lato a = 0,18 nm, con 2 atomi per cella di masse M_1 = 36 u. m. a. e M_2 = 54 u. m. a. . Il suo spettro di assorbimento infrarosso si presenta come in Figura, con E_1 = 40 meV ed E_2 = 500 meV.

1. Spiegare le osservazioni riportate in Figura.
2. Ricavare la velocità del suono

$$v_s = \sqrt{\frac{C}{2(M_1 + M_2)}}a$$

nel semiconduttore.
3. Calcolare la sua capacità termica per unità di volume C_V a T = 60 K, assumendo valido il modello di Einstein.
4. Trovare la conducibilità elettrica del semiconduttore a 300 K assumendo che elettroni e lacune abbiano la stessa mobilità μ (300) = 5,0 x10^2 m^2/Vs.

Si ricorda che l'espressione della capacità termica alla Einstein e' data dalla formula

$$C_V = Nk_B \left(\frac{\hbar\omega_0}{k_BT}\right)^2 \frac{\exp\frac{\hbar\omega_0}{k_BT}}{\left(\exp\frac{\hbar\omega_0}{k_BT} - 1\right)^2}$$

dove ω_0 è la pulsazione del modo ottico in rad/s e N è il numero di modi di oscillazione del solido per unità di volume.
Inoltre 1 meV = 1,60x10^{-22} J equivale a 11,6 K; 1 u. m. a. = 1,67x10^{-27} kg; $\hbar$ = 1,06 x10^{-34} Js^{-1}; k_B = 1,38 x10^{-23} J/K.

La densità di portatori intrinseci è data da $n_i^2 = N_C(T)N_V(T)e^{-E_G/k_BT}$ dove, nel nostro caso, $N_C(1K) = 2N_V(1K) = 4{,}8 \times 10^{23}$ /m^3.

Esercizio 2

Si consideri un ipotetico reticolo rettangolare nel piano x-y, con distanza interatomica a lungo la direzione x e b nella direzione y. Un atomo bivalente di orbitali s e d_{xy} sia disposto su ogni sito reticolare. Utilizzando il metodo del legame forte (tight binding):

a) scrivere l'espressione esplicita dell'energia ε(***k***) nelle due direzioni per le due bande. Gli integrali di trasferimento γ e gli elementi di matrice diagonali ε–β (stesso orbitale e stesso sito) dell'Hamiltoniana elettronica sono dati da:
$(|\gamma_{sx}| = 1.0\, eV;\ |\gamma_{sy}| = 1.5\, eV; |\gamma_{dx}| = 0.5\, eV;\ |\gamma_{dy}| = 1\, eV;\ \varepsilon_s - \beta_s = 2\ eV; \varepsilon_d - \beta_d = 4\, eV$
Si consideri solo l'interazione con i primi vicini.

b) Con i dati del problema, qual è il maggiore fra a e b?

c) L'espressione trovata cambia se si sostituisce l'orbitale d_{xy} con un orbitale p_z caratterizzato dagli stessi integrali di trasferimento (in modulo) e energia dello stato isolato? Se sì, come?

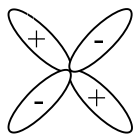
Per i soli studenti del corso del Prof. Mario Capizzi

d) Il cristallo al punto a) è un isolante o un metallo? Per quale valore di $\varepsilon_d - \beta_d$ si ha una transizione isolante-metallo (o metallo-isolante) e quale e' la natura della banda proibita: diretta o indiretta?

e) Nel caso in cui il cristallo sia un semiconduttore, indicare per quale direzione la conducibilità è massima e spiegare perché, senza necessariamente fare dei conti.

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

$$\gamma(\overline{R}) = -\int \psi^*(\overline{r})\, \Delta V(\overline{r}) \psi(\overline{r} - \overline{R})\, d\overline{r}$$



d_{xy}

Soluzione - Esercizio 1

1. Il picco a 40 meV è dovuto a un fonone trasverso ottico a $\vec{k} = 0$ triplamente degenere. La soglia di assorbimento a 500 meV è la banda proibita (diretta in quanto ha un andamento del tipo di una radice quadrata dell'energia) del semiconduttore.

2. La frequenza ottica a centro zona è

$$\nu_1 = \frac{E_1}{h} = \frac{40\times 1{,}6\times 10^{-22}}{6{,}63\times 10^{-34}} = 9{,}66\times 10^{12}\ \mathrm{s^{-1}} = \omega_1/2\pi = \frac{1}{2\pi}\sqrt{2C\left(\frac{1}{M_1}+\frac{1}{M_2}\right)} = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{2C}{\mu}} \text{ dove}$$

$$\mu = \frac{36\times 54}{36+54}\times 1{,}67\times 10^{-27} = 3{,}61\times 10^{-26}\ \mathrm{kg}$$

è la massa ridotta. Di qui

$$C = \frac{\mu}{2}4\pi^2\nu_1^{\,2} = 1{,}80\times 10^{-26}\times 4\pi^2\times\left(9{,}66\times 10^{12}\right)^2 = 66{,}3\ \mathrm{N/m}.$$

La velocità del suono è

$$v_s = \sqrt{\frac{C}{2(M_1+M_2)}}a = \sqrt{\frac{66{,}3}{2\times 90\times 1{,}67\times 10^{-27}}}\times 0{,}18\times 10^{-9} = 14{,}8\times 10^{12}\times 0{,}18\times 10^{-9} = 2675\ \mathrm{m/s}$$

3. Conviene convertire in gradi K la pulsazione del modo ottico: $\frac{\hbar\omega_0}{k_B} = 40\times 11{,}6 = 464\ \mathrm{K}$.

Inoltre $N = 3\frac{2}{a^3} = 1{,}03\times 10^{30}\ \mathrm{m^{-3}}$. La formula di Einstein, nel limite di basse temperature, diventa

$$C_V = Nk_B\left(\frac{\hbar\omega_0}{k_BT}\right)^2\exp\left(-\frac{\hbar\omega_0}{k_BT}\right) = 1{,}03\times 10^{30}\times 1{,}38\times 10^{-23}\times\left(\frac{464}{60}\right)^2\times\exp\left(-\frac{464}{60}\right) =$$
$$= 1{,}42\times 10^{7}\times 59{,}8\times 4{,}37\times 10^{-4} = 3.71\times 10^{5}\ \mathrm{J/Km^3}$$

4. La densità di portatori intrinseci è data da

$$n = p = n_i = \sqrt{N_C(1K)N_V(1K)}T^{3/2}e^{-E_2/2k_BT} = \sqrt{4{,}8\times 10^{23}\times 2{,}4\times 10^{23}}\times 300^{3/2}e^{-\frac{11{,}6\times 500}{2\times 300}} =$$
$$3{,}39\times 10^{23}\times 5{,}20\times 10^{3}\times 6{,}34\times 10^{-5} = 1{,}12\times 10^{23}\ /\mathrm{m^3}$$

Perciò la conducibilità a 300K è

$$\sigma = (n+p)e\mu = 2\times 1{,}12\times 10^{23}\times 1{,}60\times 10^{-19}\times 5{,}0\times 10^{2} = 1{,}79\times 10^{7}\ \Omega^{-1}\mathrm{m^{-1}}$$

Soluzione - Esercizio 2

a) La funzione *s* ha un integrale di trasferimento positivo nelle due direzioni, mentre la funzione d_{xy} ha sempre integrale di trasferimento negativo, per cui si ha

$$\varepsilon_s(\bar{k}) = \varepsilon_s - \beta_s - 2\gamma_{sx}\cos k_x a - 2\gamma_{sy}\cos k_y b = 2 - 2\cos k_x a - 3\cos k_y b$$
$$\varepsilon_d(\bar{k}) = \varepsilon_d - \beta_d + 2\gamma_{dx}\cos k_x a + 2\gamma_{dy}\cos k_y b = 4 + 1\cos k_x a + 2\cos k_y b$$

b) *a* è maggiore di *b*, dato che gli integrali di trasferimento sono minori lungo l'asse *x*.

c) Si, in quanto l'integrale di trasferimento della funzione p_z è sempre positivo, per cui

$$\varepsilon_p(\bar{k}) = \varepsilon_p - \beta_p - 2\gamma_{px}\cos k_x a - 2\gamma_{py}\cos k_y b = 4 - 1\cos k_x a - 2\cos k_y a$$

Il minimo della banda p_z sarà pertanto a **k**=0, mentre quello della banda d_{xy} era a bordo zona (come il massimo della banda *s*).

d)

$$\varepsilon_s(0,0) = 2 - 2 - 3 = -3\text{ eV};\ \varepsilon_s(\frac{\pi}{a},0) = 2 + 2 - 3 = 1\text{ eV};$$
$$\varepsilon_s(0,\frac{\pi}{b}) = 2 - 2 + 3 = 3\text{ eV};\ \varepsilon_s(\frac{\pi}{a},\frac{\pi}{b}) = 2 + 2 + 3 = 7\text{ eV}$$
$$\varepsilon_d(0,0) = 4 + 1 + 2 = 7\text{ eV};\ \varepsilon_d(\frac{\pi}{a},0) = 4 - 1 + 2 = 5\text{ eV};$$
$$\varepsilon_d(0,\frac{\pi}{b}) = 4 + 1 - 2 = 3\text{ eV};\ \varepsilon_d(\frac{\pi}{a},\frac{\pi}{b}) = 4 - 1 - 2 = 1\text{ eV}$$

Si ha sovrapposizione di bande lungo la direzione (1,1), per cui il cristallo risulta essere un metallo (atomi bivalenti, bande *s* e *d* parzialmente piene). Si avrà la transizione a un isolante perfetto, in tutte le direzioni, per $\varepsilon_d - \beta_d > 10$ eV e la banda proibita sarà di tipo diretto, ossia la transizione di energia minima sarà verticale a $\boldsymbol{k} = (\pm\pi/a, \pm\pi/b)$.

e) In una prima approssimazione, la conducibilità è fortemente anisotropa: nulla nella direzione (1,0), finita nelle direzioni (0,1) e (1,1) a causa della sovrapposizione fra gli estremi delle due bande. Ci si attende che sia massima lungo la (0,1), a causa della minore massa dei portatori a bordo zona della (0,1), ove le due bande sono tangenti, rispetto a quella lungo la (1,1), ove le bande si incrociano ben all'interno della zona di Brillouin (si ricordi che alla conducibilità contribuiscono fondamentalmente i portatori all'energia di Fermi).