MATERIA CONDENSATA

Proff. P. Calvani e M. Capizzi

Prova scritta – 30 Giugno 2015

Esercizio 1.

Si consideri un reticolo lineare, formato da atomi uguali bivalenti disposti lungo l'asse *z,* con parametro reticolare a=0,6 nm. La banda di valenza sia costituita di orbitali p_z, quella di conduzione di orbitali *s*.

Sapendo che si ha un assorbimento di energia elettromagnetica a partire dall'energia di 1,0 eV che si annulla all'energia di 5,0 eV, e che la massa degli elettroni a k=0 in banda di valenza è $|m_p|$= 0,30 m_0, con m_0 massa dell'elettrone libero, determinare

1) la larghezza della banda di valenza e quella della banda di conduzione;
2) la massa degli elettroni in banda di conduzione a k=0;
3) la velocità di gruppo degli elettroni a k=0, sia in banda di valenza che in banda di conduzione.

Utilizzare il modello del legame forte, trascurando l'integrale di sovrapposizione e limitando la interazione ai primi vicini. La curva di dispersione di una banda è pertanto data da

$$\varepsilon_{s,p}(\bar{k}) = E_{s,p} - \beta_{s,p} - \gamma_{s,p}\left(e^{ika} + e^{-ika}\right) \quad \text{con} \quad \gamma_{s,p} = -\int \psi^*_{s,p}(\bar{r})\Delta V(\bar{r})\psi_{s,p}(\bar{r} - \bar{R})\,d\bar{r}$$

e = 1,60 x10^{-19} C; m_0= 0,9x10^{-27} gr

Esercizio 2.

Il sodio (Na) è un metallo monovalente, di peso atomico A = 23 u. m. a. e densità di massa ρ = 0.97x10^3 Kg m^{-3}, che cristallizza in una struttura cubica a corpo centrato (bcc) .

1. Calcolare la costante di Hall del Na e dire se ci si aspetta che dipenda o no dalla temperatura: se sì, in che modo.
2. Trovare la massa efficace dei portatori liberi utilizzando il modello di Drude-Sommerfeld ma assumendo che la banda di conduzione sia descritta da $\varepsilon(k) = Bk^2 + Ck^4$ con B = 5,2 x10^{-38} J m^2 e C = 1,5x10^{-59} J m^4 .
3. Sempre ponendosi nel modello di Drude-Sommerfeld e assumendo che il cammino libero medio degli elettroni vari con la temperatura come $\lambda(T) = \dfrac{7.65 \times 10^6}{T^2} d$ (m) (dove T è la temperatura assoluta e d è la distanza fra atomi di Na primi vicini) calcolare la conducibilità elettrica del Na a 300 K.

1 u.m.a = 1,66 x10^{-27} kg; e = 1,60 x10^{-19} C; $\hbar$ = 1,05 x10^{-34} Js

Soluzione 1.

1) $\varepsilon_{s,p}(\bar{k}) = E_{s,p} - \beta_{s,p} - \gamma_{s,p}\left(e^{ika} + e^{-ika}\right) = E_{s,p} - \beta_{s,p} - 2\gamma_{s,p}\cos ka$

per cui la banda di valenza ($\gamma_p < 0$) ha un massimo a k=0 e un minimo a $k=\pm\pi/a$, mentre l'opposto avviene per la banda di conduzione ($\gamma_s > 0$). L'energia minima alla quale si ha assorbimento corrisponde alla gap (a k=0), mentre la massima corrisponde alla differenza di energia fra le due bande a $k=\pm\pi/a$. La differenza fra energia massima e minima di assorbimento è pertanto pari alla somma della larghezza della banda di conduzione ($4\gamma_s$) e di valenza ($4\gamma_p$), per cui

(5-1) eV = $4(\gamma_s + \gamma_p)$

Si sa inoltre che la massa dell'elettrone è data da

$$\left(\frac{1}{m^*(\bar{k})}\right)_{ij} = \frac{1}{\hbar^2}\frac{d^2\varepsilon(\bar{k})}{dk_i dk_j} \qquad i, j = x, y, z$$

per cui nel nostro caso di legame forte e catena lineare di atomi si ha

$$\frac{1}{m^*(\bar{k})} = \frac{1}{\hbar^2}\frac{d^2\varepsilon(\bar{k})}{dk^2} \quad \text{e, a } k = 0,$$

$$\left|m_p^*(\bar{k} = 0)\right| = \frac{\hbar^2}{2\gamma_p a^2} = \frac{\left(1{,}05\times10^{-34}\right)^2}{2\gamma_p\left(3\times10^{-10}\right)^2}$$

$$\gamma_p = \frac{\hbar^2}{2m_p^* a^2} = \frac{\left(1{,}05\times10^{-34}\right)^2}{2\times0{,}3\times0{,}9\times10^{-30}\times\left(6\times10^{-10}\right)^2\times1{,}6\times10^{-19}} = 0{,}35 \text{ eV}$$

La banda di valenza, che ha una larghezza di $4\gamma_p$, è pertanto pari a 1.4 eV, mentre la larghezza della banda di conduzione è pari a 5,0-1,0-1,4=2,6 eV.

2) La massa degli elettroni in banda di conduzione sarà data da

$$m_s^*(\bar{k} = 0) = \frac{\hbar^2}{2\gamma_s a^2} = \frac{\left(1{,}05\times10^{-34}\right)^2}{1{,}3\times1{,}6\times10^{-19}\times\left(6\times10^{-10}\right)^2} = 1.5\times10^{-31} \text{ kg}$$

$$m_s^*(\bar{k} = 0) = m_p^*(\bar{k} = 0)\frac{0.7}{1.3} = 0{,}3\frac{0.7}{1.3} = 0{,}16\, m_0$$

3) La velocità di gruppo degli elettroni è proporzionale alla derivata prima dell'energia ed è quindi nulla nei punti di massimo e minimo delle curve di dispersione, ovvero nel nostro caso.

Soluzione 2.

1. Nel SI la costante di Hall di un metallo è

$$R_H = \frac{-1}{e n_e} = \frac{-1}{e}\frac{A \times M_{uma}}{\rho} = -\frac{23 \times 1{,}66 \times 10^{-27}}{1{,}6 \times 10^{-19} \times 0{,}97 \times 10^{3}} = -2{,}5 \times 10^{-10}\ m^3/C$$

dato che il Na è monovalente e $\rho = n \times A \times M_{uma}$. Inoltre R_H non dipende da T perché in un metallo n è costante.

2. La massa efficace degli elettroni liberi va calcolata al livello di Fermi: nel modello D-S si ha

$$k_F = \left(3\pi^2 n\right)^{\frac{1}{3}} = \left(3 \times 9{,}9 \times 25 \times 10^{27}\right)^{\frac{1}{3}} = 9 \times 10^{9}\ m^{-1}$$

e quindi

$$m^* = \frac{\hbar^2}{2B + 12Ck_F^2} = \frac{\left(1{,}05 \times 10^{-34}\right)^2}{2 \times 5{,}2 \times 10^{-38} + 12 \times 1{,}5 \times 10^{-59} \times \left(9{,}0 \times 10^{9}\right)^2} =$$

$$= \frac{1{,}1 \times 10^{-68}}{1{,}04 \times 10^{-37} + 1{,}5 \times 10^{-38}} = 0{,}9 \times 10^{-31}\ \text{kg}$$

3. La conducibilità elettrica è

$$\sigma(300) = \frac{ne^2\tau(T)}{m^*} = \frac{ne^2\lambda(T)}{m^* v_F} = \frac{ne^2}{m^* v_F}\frac{7{,}65 \times 10^{6}}{300^2} d = \frac{ne^2}{m^* v_F} 85d$$

Nella struttura bcc, con 2 atomi per ogni cella di lato a, i primi vicini distano

$$d = \frac{a\sqrt{3}}{2} = \left(\frac{2}{n}\right)^{\frac{1}{3}}\frac{\sqrt{3}}{2} = \left(\frac{2}{25 \times 10^{27}}\right)^{\frac{1}{3}}\frac{\sqrt{3}}{2} = 0{,}37\ \text{nm}$$

Inoltre

$$m^* v_F = \hbar k_F = 1{,}05 \times 10^{-34} \times 9{,}0 \times 10^{9} = 1 \times 10^{-24}\ \text{kg m/s}$$

$$\left[v_F = 1{,}0 \times 10^{7}\ \text{m/s}\right]$$

Perciò

$$\sigma(300) = \frac{ne^2}{m^* v_F} 85d = \frac{2{,}5 \times 10^{28} \times \left(1{,}6 \times 10^{-19}\right)^2}{1 \times 10^{-24}} 85 \times 0{,}37 \times 10^{-9} = 2{,}0 \times 10^{7}\ (\Omega\text{m})^{-1}$$