

MATERIA CONDENSATA

Proff. P. Calvani e M. Capizzi

Prova scritta - 5 Febbraio 2015

Esercizio 1.

Si consideri un sistema ideale bidimensionale di atomi monovalenti tutti uguali disposti su un reticolo quadrato di lato L .

- 1) Si valuti l'energia di Fermi di tale sistema in un modello a elettrone quasi libero, se la densità di portatori è $n = 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ e la massa efficace degli elettroni è $m^* = 0.05 m_0$, ove m_0 è la massa dell'elettrone nel vuoto.
- 2) Discutere come cambia la conducibilità σ del sistema (aumenta, diminuisce, resta costante?) lungo la direzione x nelle ipotesi di cui al punto 1), sempre in un modello a elettrone quasi libero, al variare della temperatura da $T=0 \text{ K}$ a $T=100 \text{ K}$, e spiegarne il motivo. L'ampiezza della banda di conduzione è di 10 eV e il tempo di vita τ dei portatori viene supposto indipendente dalla temperatura nell'intervallo considerato.
- 3) Si dica quanto varrebbe a $T=0$ la conducibilità σ del sistema di cui al punto 2) nella ipotesi che la curva di dispersione dell'energia della banda di conduzione fosse invece data, in eV, da

$$E(k) = 5 \cos(ka)$$

Discutere poi come cambia σ in questo caso (aumenta, diminuisce, resta costante?) al variare della temperatura da $T=0 \text{ K}$ a $T=100 \text{ K}$ e spiegarne il motivo. Si continui a supporre il tempo di vita τ dei portatori indipendente dalla temperatura nell'intervallo considerato.

$$m_0 = 9,11 \times 10^{-28} \text{ g}; \quad 1\text{eV} = 1.6 \times 10^{-12} \text{ erg}$$

Esercizio 2.

Un metallo monoatomico e monovalente, avente una densità $\rho = 7,5 \text{ g/cm}^3$ che assumeremo costante con la temperatura, cristallizza nella struttura cubica semplice. La sua capacità termica per unità di volume viene misurata in funzione di T . Alcuni risultati sono riportati nella seguente Tabella:

T (K)	0,1	1,0	5,0	10,0	500
c_v (erg/K cm^3)	$2,5 \times 10^3$	$6,0 \times 10^4$	$4,5 \times 10^6$	$3,5 \times 10^7$	$1,1 \times 10^8$

- a) Trovare la massa atomica M e il parametro reticolare a .
- b) Sapendo che il contributo degli elettroni liberi c_v^e e quello del reticolo c_v^r sono dello stesso ordine di grandezza a 1 K , ricavare per questo metallo la frequenza di Debye ω_D e la temperatura di Fermi T_F degli elettroni.

c) determinare la velocità del suono v nel metallo.

Spiegare i motivi delle approssimazioni utilizzate.

Si ricorda che la capacità termica per unità di volume di un metallo isotropo monovalente è data da

$$c_v(T) = nk_B \left[\frac{12\pi^4}{5} \left(\frac{T}{T_D} \right)^3 + \frac{\pi^2}{2} \left(\frac{k_B T}{E_F} \right) \right]$$

dove n è la densità degli atomi.

$$\hbar = 1,05 \times 10^{-27} \text{ erg} \cdot \text{s}; \quad k_B = 1,38 \times 10^{-16} \text{ erg/K}$$

Soluzione 1.

- 1) L'energia di Fermi si ricava come in un sistema tridimensionale, salvo che la dimensionalità 2 del sistema introduce delle variazioni. Se N è il numero totale degli elettroni in banda di conduzione, a $T=0$ si ha

$$N = \int_0^{E_F} g_{2D}(E) dE$$

ove g_{2D} è la densità degli stati in 2 dimensioni:

$$g_{2D}(E) = \frac{dN}{dk} \frac{dk}{dE} = \frac{d\left[\left(\frac{L}{2\pi}\right)^2 2\pi k^2\right]}{dk} \frac{dk}{dE} = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^2 4\pi k \frac{m^*}{\hbar^2 k} = \frac{mL^2}{\hbar^2 \pi}$$

$$n = \frac{N}{L^2} = \frac{1}{L^2} \int_0^{E_F} g_{2D}(E) dE = \int_0^{E_F} \frac{m}{\hbar^2 \pi} dE = \frac{m^*}{\hbar^2 \pi} E_F$$

$$E_F = \frac{\pi \hbar^2}{m^*} n = \frac{3.14 \times (1.05 \times 10^{-27})^2}{0.05 \times 0.91 \times 10^{-27}} 10^{14} = 7.6 \times 10^{-12} \text{ erg} = 4.7 \text{ eV}$$

- 2) In un modello a elettrone quasi libero, la massa dei portatori che partecipano effettivamente alla conducibilità (quelli entro un KT dal potenziale chimico o dall'energia di Fermi a $T=0$, sempre quasi esattamente a metà zona di Brillouin per un metallo con ampiezza di banda di 10 eV, come nel nostro caso) ha un valore finito che non varia nel passare da $T=0$ a $T=100$ K. Infatti $KT=100/11600 = 8.6 \times 10^{-3}$ eV è molto piccolo rispetto alla larghezza di banda di 10 eV e gli estremi di banda, ove la massa cambia (da positiva diventa addirittura negativa a $k=\pm\pi/a$) sono lontani ~ 5 eV. La conducibilità non cambia.
- 3) In tal caso la massa efficace degli elettroni al potenziale chimico (sempre a metà banda) è infinita in un modello ideale. A $T=0$, quando solo i portatori all'energia di Fermi contribuiscono alla conducibilità, la conducibilità è pertanto nulla. A $T=100$ K, finita, contribuiscono anche elettroni al di sopra e al di sotto del potenziale chimico, con massa efficace finita, rispettivamente negativa e positiva, per cui la conducibilità assumerebbe un valore finito e quindi crescerebbe rispetto al caso di $T=0$ (il tempo di scattering non dipende dalla temperatura), questo almeno nel caso di dimensionalità 3. Nel caso di dimensionalità 2, invece, essendo la densità degli stati costante, resta costante anche la conducibilità perché si elidono i contributi degli elettroni con massa positiva e carica negativa al di sotto del potenziale chimico con quello degli elettroni con massa negativa e carica negativa al di sopra del potenziale chimico. Data la delicatezza di questa ultima argomentazione, viene accettata anche l'argomentazione strettamente valida nel caso 3D.

Soluzione 2.

a) Nella ragionevole ipotesi, da confermare a posteriori, che a 500 K si possa adottare il modello classico $c_v(T) = 3nk_B$, si ricava

$$n = \frac{c_v(500)}{3k_B} = \frac{1,1 \times 10^8}{3 \times 1,38 \times 10^{-16}} = 2,7 \times 10^{23}$$

$$a = \frac{1}{\sqrt[3]{n}} = 1,6 \times 10^{-8} \text{ cm}$$

$$M = \frac{\rho}{n} = \frac{7,5}{2,7 \times 10^{23}} = 2,8 \times 10^{-23} \text{ g}$$

b) Se i contributi c_v^r e c_v^e sono dello stesso ordine di grandezza a 1 K, poiché al diminuire di T il primo cala proporzionalmente a T e l'altro a T^3 , a 0,1 K c_v^r sarà di due ordini di grandezza più piccolo di c_v^e e si potrà trascurare. Perciò, poiché n è anche il numero degli elettroni,

$$c_v(0,1 \text{ K}) \cong c_v^e(0,1 \text{ K}) \cong nk_B \frac{\pi^2}{2} \left(\frac{0,1}{T_F} \right)$$

$$T_F = nk_B \frac{\pi^2}{2} \frac{0,1}{c_v(0,1)} =$$

$$= 2,7 \times 10^{23} \times 1,38 \times 10^{-16} \frac{\pi^2}{2} \frac{0,1}{2,5 \times 10^3} = 7,4 \times 10^3 \text{ K}$$

Analogamente, a 10 K si potrà trascurare il contributo c_v^e rispetto a c_v^r e ricavare la temperatura di Debye da

$$c_v(10 \text{ K}) \cong c_v^r(10 \text{ K}) = nk_B \frac{12\pi^4}{5} \left(\frac{T}{T_D} \right)^3$$

$$T_D = \left(2,7 \times 10^{23} \times 1,38 \times 10^{-16} \frac{12\pi^4}{5 \times 3,5 \times 10^7} \right)^{1/3} \times 10 = 63 \text{ K}$$

Quindi è giustificata a posteriori l'ipotesi che a $c_v(500 \text{ K})$ si possa applicare il limite classico. Di qui si ricava la frequenza di Debye

$$\omega_D = \frac{k_B T_D}{\hbar} = \frac{1,38 \times 10^{-16} \times 63}{1,05 \times 10^{-27}} = 8,3 \times 10^{12} \text{ rad/s}$$

c) La velocità del suono nelle tre branche degeneri si ricava, per un reticolo cubico monoatomico, da

$$\omega_D = vK_D = v(6\pi^2 n)^{\frac{1}{3}}$$
$$v = \frac{\omega_D}{(6\pi^2 n)^{\frac{1}{3}}} = \frac{8,3 \times 10^{12}}{(6\pi^2 \times 2,7 \times 10^{23})^{\frac{1}{3}}} = 3,3 \times 10^4 \text{ cm/s}$$