

Esonero di Materia Condensata del 9-12-2010

Proff. Paolo Calvani – Mario Capizzi

Esercizio 1

L'Ag è un metallo monovalente che cristallizza nella struttura cubica a facce centrate con densità $\rho = 10,5 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$ e peso atomico $A = 108$. Il potenziale chimico è praticamente indipendente dalla temperatura.

1. Si trovino il parametro reticolare a (lato della cella cubica), la distanza d fra primi vicini e la costante di Hall dell'Ag.

2. Assumendo che intorno al livello di Fermi valga ancora la relazione $\varepsilon(k) = Bk^2$, con $B = 6,9 \times 10^{-39}$ Unità SI, si trovino la massa efficace degli elettroni, l'energia di Fermi e la velocità di Fermi.

3. Assumendo che il cammino libero medio degli elettroni per $T > 100 \text{ K}$ vari come $\lambda(T) = \frac{1000d}{0.038T}$, si determini la conducibilità elettrica σ dell'argento a 300 K.

Massa del protone $M_p = 1,67 \times 10^{-27} \text{ kg}$; $\hbar = 1,05 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$; $e = 1,60 \times 10^{-19} \text{ C}$; costante di Hall nel SI:

$R_H = -\frac{1}{ne}$. Il vettore d'onda di Fermi è $k_F = (3\pi^2 n)^{\frac{1}{3}}$ dove n è la densità di elettroni.

Esercizio 2

In una catena lineare monoatomica di passo a fatta di atomi bivalenti e disposta lungo l'asse z , le bande sono ben descritte, in un modello tight binding, da una base di due orbitali atomici $|s\rangle$ e $|p_z\rangle$ su ciascun atomo. Gli unici elementi di matrice dell'Hamiltoniana elettronica non nulli sono (i) quelli sullo stesso sito, che valgono $\varepsilon_{os} = 0 \text{ eV}$ per l'orbitale $|s\rangle$ e $\varepsilon_{op} = 4 \text{ eV}$ per l'orbitale $|p_z\rangle$, e (ii) quelli fra orbitali dello stesso tipo su siti primi vicini, che valgono $|\gamma_s| = 1 \text{ eV}$ fra due orbitali $|s\rangle$ e $|\gamma_p| = 0,5 \text{ eV}$ fra due orbitali $|p_z\rangle$ primi vicini. Si chiede:

- Scrivere l'espressione esplicita delle bande e dire se la catena è isolante o metallica.
- Dire per quale per quali valori di k la gap di energia è minima e quanto vale. Fare un disegno schematico delle bande nella I zona di Brillouin.
- Dire per quale valore di k la velocità di gruppo degli elettroni di tipo s e di tipo p è massima in modulo e dove si annulla. Calcolare la massa efficace degli elettroni di tipo s e di tipo p a $k=0$.

Gli studenti del corso da 9 crediti rispondano inoltre alle seguenti domande:

- Sia ora $|\gamma_p| = X \text{ eV}$, dove X è una variabile. Per quale intervallo di valori di X la catena è isolante e per quale intervallo è metallica?
- Quanti sono i valori di $|k_F|$ se $X = 0.5, 1$, ovvero 1.5 ?
- FACOLTATIVA:** solo per gli studenti del corso da 9 CFU che avessero finito i due esercizi. Se $X = 0.7$, per quale temperatura il potenziale chimico arriverebbe a toccare la cima della banda di valenza e il materiale diventerebbe (fortemente) degenere?

Esercizio 1-Soluzione

1. Se N è la densità di atomi, e poiché nell'fcc ci sono 4 atomi per cella,

$$N = \frac{\rho}{AM_p} = \frac{10,5 \times 10^3}{108 \times 1,67 \times 10^{-27}} = 5,8 \times 10^{28} \text{ m}^{-3}$$

$$a = \left(\frac{4}{N} \right)^{\frac{1}{3}} = \left(\frac{4}{5,8 \times 10^{28}} \right)^{\frac{1}{3}} = 4,1 \times 10^{-10} \text{ m}$$

La distanza tra primi vicini è

$$d = \frac{a}{\sqrt{2}} = \frac{4,1 \times 10^{-10}}{1,41} = 2,9 \times 10^{-10} \text{ m}$$

Poiché il metallo è monovalente, la densità di elettroni è $n = N$. La costante di Hall pertanto è

$$R_H = -\frac{1}{ne} = -\frac{1}{5,8 \times 10^{28} \times 1,6 \times 10^{-19}} = -1,1 \times 10^{-10} \text{ m}^3/\text{C}$$

2. La massa efficace è

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial k^2}} = \frac{\hbar^2}{2B} = \frac{(1,05 \times 10^{-34})^2}{2 \times 6,9 \times 10^{-39}} = 8,0 \times 10^{-31} \text{ kg}$$

(espressione valida sempre). Nel modello dell'elettrone quasi libero si poteva anche utilizzare la

$$m^* = \frac{\hbar^2 k^2}{2\varepsilon} = \frac{\hbar^2 k^2}{2Bk^2} = \frac{\hbar^2}{2B}$$

L'energia di Fermi è

$$\begin{aligned} \varepsilon_F &= \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{\frac{2}{3}} = \frac{(1,05 \times 10^{-34})^2}{2 \times 8,0 \times 10^{-31}} (3\pi^2 \times 5,8 \times 10^{28})^{\frac{2}{3}} = 6,9 \times 10^{-19} \times 1,4 \times 10^{20} = \\ &= 9,9 \times 10^{-19} \text{ J} = 6,2 \text{ eV} \end{aligned}$$

La velocità di Fermi si ottiene da

$$\begin{aligned} \varepsilon_F &= \frac{1}{2} m^* v_F^2, \\ v_F &= \sqrt{\frac{2\varepsilon_F}{m^*}} = \sqrt{\frac{2 \times 9,9 \times 10^{-19}}{8,0 \times 10^{-31}}} = 1,6 \times 10^6 \text{ m/s} \end{aligned}$$

3. Sia nel modello classico di Drude che in quello quantistico

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m^*} = \frac{ne^2\lambda}{m^*v}$$

Tuttavia nel secondo caso, più corretto, $v = v_F$ mentre nel primo caso $v = v_{termica}$.

$$\text{Poiché } \lambda(300) = \frac{1000 \times 2,9 \times 10^{-10}}{0,038 \times 300} = 2,54 \times 10^{-8} \text{ m}$$

si ottiene nel modello quantistico

$$\sigma = \frac{ne^2}{m^* v_F} \lambda = \frac{5,8 \times 10^{28} (1,6 \times 10^{-19})^2 \times 2,54 \times 10^{-8}}{8,0 \times 10^{-31} \times 1,6 \times 10^6} = 2,94 \times 10^7 \Omega^{-1} \text{m}^{-1}$$

e in quello classico

$$v_{\text{termica}} = \sqrt{\frac{3k_B T}{m^*}} = \left(\frac{3 \times 1,38 \times 10^{-23} \times 300}{8 \times 10^{-31}} \right)^{1/2} = 12,5 \times 10^4 \text{ms}^{-1}$$

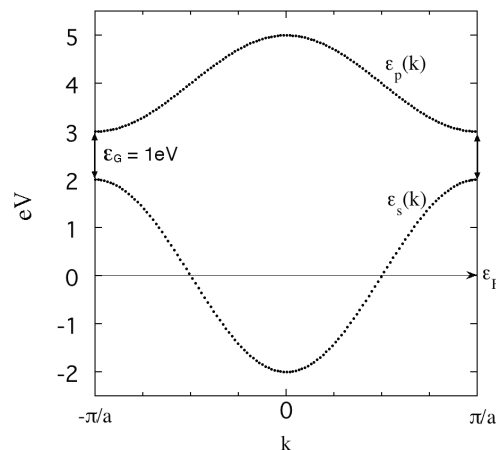
$$\sigma = \frac{ne^2}{m^* v_{\text{termica}}} \lambda = \frac{5,8 \times 10^{28} (1,6 \times 10^{-19})^2 \times 2,54 \times 10^{-8}}{8,0 \times 10^{-31} \times 12,5 \times 10^4} = 3,8 \times 10^8 \Omega^{-1} \text{m}^{-1}$$

Vengono accettate entrambe le soluzioni dell'esercizio.

Esercizio 2 - Soluzione

Come è noto, l'integrale di trasferimento γ è positivo per gli stati $|s\rangle$ e negativo per gli stati $|p_z\rangle$.

a. Ci sono due bande di energia, una derivante dagli orbitali s e una derivante dagli orbitali p_z , di forma $\epsilon_s(k) = \epsilon_{os} - 2\gamma_s \cos(ka)$; $\epsilon_p(k) = \epsilon_{op} - 2\gamma_p \cos(ka)$, con $\gamma_s = 1 \text{ eV}$ e $\gamma_p = -0,5 \text{ eV}$, mostrate in figura.



La catena è isolante perché i 2 elettroni per atomo riempiono tutti gli stati della banda s e esiste una gap di energia fra le due bande.

b. La gap è minima a $k = \pm \frac{\pi}{a}$ e vale

$$\epsilon_G = \epsilon_s(k = \pm \pi/a) - \epsilon_p(k = \pm \pi/a) = \epsilon_{op} - 2\gamma_p \cos(\pm\pi) - [\epsilon_{os} - 2\gamma_s \cos(\pm\pi)] = 4 - 2(-0,5)(-1) - (0 - 2(-1)) = 1 \text{ eV}.$$

c. La velocità di gruppo è per entrambe le bande

$$v_g = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \epsilon}{\partial k} = \frac{2\gamma a}{\hbar} \sin ka = 0$$

Perciò si annulla sia in $k = 0$ che in $k = \pm \frac{\pi}{a}$, mentre è massima in modulo in $k = \pm \frac{\pi}{2a}$

La massa efficace si ricava da

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \epsilon}{\partial k^2} = \frac{2\gamma a^2}{\hbar^2} \cos ka$$

$$m_s^* = \frac{\hbar^2}{2\gamma_s a^2} = \frac{\hbar^2}{2a^2} > 0$$

$$m_p^* = \frac{\hbar^2}{2\gamma_p a^2} = \frac{-\hbar^2}{a^2} < 0$$

d. La gap di energie proibite e' data da

$\epsilon_G = 4 - 2X - 2 = 2(1 - X)$ e pertanto si ha un isolante per $0 \leq X < 1$ mentre per $X \geq 1$ si ha un metallo.

e. Per $X=0.5$ e $X=1$ si ha un solo valore di k_F ($a \pm \pi/a$, ma contano per uno solo perché differiscono di un vettore del reticolo reciproco), mentre per $X=1.5$ si hanno due valori distinti di k_F interni alla I zona e uguali in modulo. Poiché però si chiede il modulo, il valore è sempre uno. In quest'ultimo caso ϵ_F passa per i due punti di incrocio delle due bande, come determinato dalla condizione di invarianza del numero totale di stati occupati.

Il valore di k_F , non richiesto nell'esercizio, e' immediatamente determinato dalla condizione di uguaglianza fra l'energia delle due bande:

$$-2 \cos(k_F a) = 4 + 3 \cos(k_F a)$$

$$\cos(k_F a) = -\frac{4}{5}$$

$$k_F = \frac{1}{a} \arccos(-0.8)$$

f. Nel caso dei semiconduttori, il potenziale chimico e' determinato dal rapporto fra le masse efficaci di elettrone e lacuna, rispettivamente in banda di conduzione e valenza, secondo la relazione

$$= E_G/2 + 0.75 kT \ln (m_h^* / m_e^*)$$

Le masse efficaci di elettrone e lacuna, nel presente caso, valgono a bordo zona

$$m_h^* = \frac{\hbar^2}{2\gamma_s a^2} = \frac{\hbar^2}{2a^2}$$

$$m_e^* = \frac{\hbar^2}{2\gamma_p a^2} = \frac{\hbar^2}{2X a^2}$$

per cui

$$= E_G/2 + 0.75 kT \ln (m_h^* / m_e^*) = 1 - X + 0.75 kT \ln(X)$$

La condizione di (forte) degenerazione ($= 0$) si ottiene perciò non appena

$$0 = 1 - X + 0.75 kT \ln(X) = 0.3 + 0.75 kT \ln(0.7)$$

ossia

$$kT = -0.3 / [0.75 \ln(0.7)] = 1.12 \text{ eV}$$