Corso di Materia condensata

Prova scritta del 14-2-13

Proff. P. Calvani e M. Capizzi

Esercizio 1

In un reticolo lineare di passo *a* e disposto lungo l'asse *z*, con base costituita da un atomo monovalente, la banda di piu' bassa energia deriva da orbitali *s* e quella a piu' alta energia da orbitali p_z.

1) Usando il metodo del tight binding, trascurando l'integrale di sovrapposizione α e limitando l'interazione ai primi vicini: a) scrivere la $E(\boldsymbol{k})$ per le due bande; b) tracciarne un grafico approssimativo indicando quali stati sono occupati; c) trovare a quali valori di $\boldsymbol{k}$ si hanno la minima e massima energia di transizione a T = 0 per assorbimento di radiazione elettromagnetica, dandone i rispettivi valori.
2) Rispondere alle stesse domande a) - c) di cui al punto 1) nel caso in cui la base sia costituita da un atomo di valenza due, specificando fra quali valori di *k* sono occupate le due bande.

$E_s - \beta_s = -9$ eV; $E_p - \beta_p = -7.5$ eV; $|\gamma_s| = 1$ eV; $|\gamma_p| = 0.75$ eV, dove γ misura l'interazione intersito e β l'interazione intrasito.

Esercizio 2

In un semiconduttore drogato con $N_A = 6{,}4 \times 10^{19}$ m^{-3} accettori, $\varepsilon_g = 25\,\varepsilon_a$, dove ε_g è l'energia della gap e ε_a l'energia di legame degli accettori. A T =10 K le lacune hanno un tempo medio di scattering $\tau_h(10) = 1{,}20\times10^{-12}$ s e una mobilità $\mu_h = 0{,}75$ m^2/Vs; la costante di Hall è $R_H = +28$ m^3/C. La massa efficace delle lacune, indipendente dalla temperatura, è uguale a quella degli elettroni.

1. Trovare ε_a e la conducibilità elettrica σ del materiale a 10 K.
2. Determinare la conducibilità elettrica del semiconduttore a T = 300 K, sapendo che $\tau_h(300) = \tau_e(300)/3 = 0{,}5\times10^{-13}$ s.

Si ricorda che la densità degli stati in banda di valenza è $N_V = 2\left(\frac{m_h k_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}$ e che

$$R_H = \frac{1}{e}\frac{p\mu^2{}_b - n\mu^2{}_e}{(p\mu_b + n\mu_e)^2} \text{ m}^3/\text{C}.$$

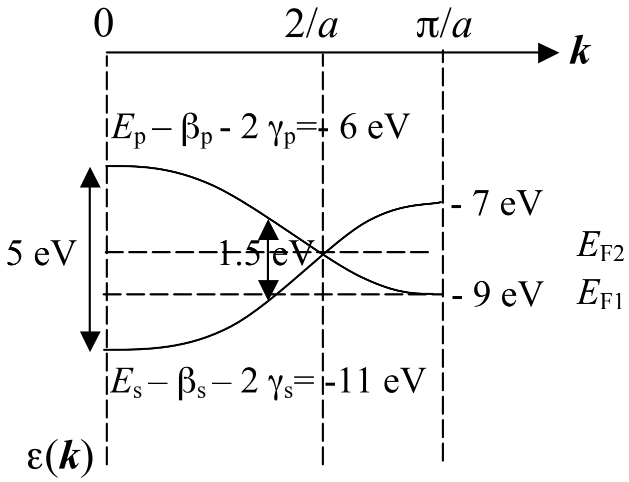
e=1,6×10^{-19} C; k_B=1,38×10^{-23} J K^{-1}; $\hbar$=1,05×10^{-34} J •s;

Soluzioni

Esercizio 1

1) Gli integrali di sovrapposizione sono positivi per la banda *s* e negativi per la banda p_z, per cui

$E_s(k)= E_s-\beta_s-2\gamma_s\cos(ka) = -9 -2\cos(ka)$; $E_p(k)= -7.5 +1.5\cos(ka)$



Essendo la base costituita da un atomo monovalente, la banda *s* e' piena a meta', con lo stato occupato di piu' alta energia a $k_F=\pi/2a$, ovvero a -9 eV, mentre la banda *p* e' vuota. Lo stato a $k_F=\pi/2a$ nella banda *p* si trova a -7.5 eV, per cui la transizione per assorbimento di radiazione elettromagnetica a energia minima si ha a 1.5 eV. La transizione per assorbimento di radiazione elettromagnetica a energia massima si ha invece per k=0, a 5 eV.

2) Nel caso di atomi bivalenti, le bande *s* e *p* saranno entrambe parzialmente piene, la banda *s* da $k=0$ a $k=2/a$ e la banda *p* da $k=2/a$ a $k=\pi/a$. Infatti deve valere la condizione

$$-9 - 2\cos(ka) = -7 + 1.5\cos(ka)$$

e pertanto la transizione per assorbimento di radiazione elettromagnetica a energia minima si ha a $0+\delta$ eV, con δ comunque piccolo ma positivo; la massima a 5 eV, come nel caso precedente.

Esercizio 2

1. Date le ipotesi, a 10 K si può trascurare il ruolo dei portatori intrinseci. Dalla mobilità

$$\mu_h(10) = \frac{e\tau(10)}{m_h}$$

si ricava $m_h = \dfrac{e\tau}{\mu_h} = \dfrac{1{,}60\times10^{-19}\times1{,}20\times10^{-12}}{0{,}75} = 2{,}56\times10^{-31}$ kg

Quindi $N_V(10) = 2\left(\frac{m_h k_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} = 2\left(\frac{2{,}56\times10^{-31}\times1{,}38\times10^{-23}\times10}{2\pi\times\left(1{,}05\times10^{-34}\right)^2}\right)^{3/2} = 2{,}30\times10^{22}\ \text{m}^{-3}$

Dalla costante di Hall $R_H \cong \frac{1}{pe} = 28\ \text{m}^3/\text{C}$

si ottiene $p = \frac{1}{R_H e} = \frac{1}{28\times1{,}60\times10^{-19}} = 2{,}23\times10^{17}\ \text{m}^{-3}$

Da $p \cong \sqrt{N_V N_A}\,\boldsymbol{exp}\left(-\varepsilon_a/2k_B T\right)$ infine si ottiene

$$\varepsilon_a = 2k_B T \ln\frac{\sqrt{N_V N_A}}{p} = 2\times1{,}38\times10^{-23}\times10\times\ln\frac{\sqrt{2{,}30\times10^{22}\times6{,}4\times10^{18}}}{2{,}23\times10^{17}} = 2{,}05\times10^{-21}\ \text{J} = 13\ \text{meV}$$

Inoltre

$$\sigma \cong qp\mu_h = 1{,}60\times10^{-19}\times2{,}23\times10^{17}\times0{,}75 = 0{,}027\ \Omega^{-1}\text{m}^{-1}$$

2. La densità di portatori intrinseci, poiché le loro masse efficaci sono uguali, è

$$n_i(300) = \sqrt{N_C N_V}\,e^{-\frac{\varepsilon_g}{2k_B T}} = N_V(10)\left(\frac{300}{10}\right)^{3/2} e^{-\frac{\varepsilon_g}{2k_B T}} = 2{,}30\times10^{22}\times\left(\frac{300}{10}\right)^{3/2}\times\exp\left(-\frac{25\times0{,}013\times11605}{600}\right) =$$

$$= 2{,}30\times10^{22}\times1.64\times10^2\times0.0019 = 7{,}0\times10^{21}\ \text{m}^{-3}$$

Poiché $n_i >> N_A$ predomina il regime intrinseco. Quindi le densità elettroni e lacune sono uguali:

$n \cong p = 7{,}0\times10^{21}\ /\text{m}^3$ e

$$\sigma = ne\mu_e + pe\mu_h = \frac{e^2\tau_h}{m_h}(3n+p) = \frac{4pe^2\tau_h}{m_h} = \frac{4\times7{,}0\times10^{21}\times(1{,}6\times10^{-19})^2\times0{,}5\times10^{-13}}{2{,}56\times10^{-31}} = 140\ \Omega^{-1}\text{m}^{-1}$$