Esonero di Materia Condensata del 1 Febbraio 2011

Paolo Calvani – Mario Capizzi

Esercizio 1

Un isolante ha una struttura cubica semplice, con lato del cubo a = 2 Å e una base di 2 atomi per cella di masse M_1 e M_2. La massa dello ione più pesante è $M_1 = 4{,}5\times10^{-23}$ g.
Supponiamo che nell'assorbimento infrarosso si osservi una singola riga a $\nu_0 = 155$ cm^{-1}, mentre la diffusione anelastica dei neutroni fornisca questi dati, per qualunque direzione dell'impulso dei neutroni:

ω (rad/s)	$2{,}4\times10^{8}$	$3{,}6\times10^{8}$	5×10^{8}	....	12×10^{12}
k (cm^{-1})	1200	1800	2500	....	$1{,}57\times10^{8}$

1. Spiegare a quali modi del reticolo si riferiscono i risultati dei due esperimenti. Trovare la velocità del suono v_s, la costante elastica C, la massa M_2, la densità ρ del solido.
2. Ricavare la temperatura di Debye del solido e la sua capacità termica per unità di massa a 10 K.
3. Ricavare la capacità termica per unità di massa a 750 K giustificando le approssimazioni utilizzate.

Si ricorda che, per una catena lineare biatomica, a centro zona

$$\omega_{ottica} = \sqrt{2C\left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2}\right)} \quad \text{e a bordo zona} \quad \omega_{ottica} = \sqrt{\frac{2C}{M_2}}; \ \omega_{acustica} = \sqrt{\frac{2C}{M_1}};$$

la densità degli stati nel modello di Debye è $D(\omega) = \dfrac{V\omega^2}{2\pi^2 v_s^3}$, la capacità termica per unità di volume a

$T \ll T_D$ è $C_v / V = 3\times\dfrac{4\pi^4}{5} n k_B \left(\dfrac{T}{T_D}\right)^3$ con n = numero di *atomi* per unità di volume.

Esercizio 2

Si abbia un semiconduttore intrinseco di cui siano note a temperatura ambiente la conducibilita' σ(300)=4.5x10^{-4} Ω^{-1}m^{-1}, il coefficiente di Hall R_H(300) = - 2.35x10^{2} m^{3}C^{-1}, e la mobilita' degli elettroni μ_e(300)=0.15 m^{2}V^{-1}s^{-1}; inoltre si conoscono a 600 K la mobilità degli elettroni μ_e(600)= 0.042 m^{2}V^{-1}s^{-1}, delle lacune μ_h(600)= 0.01 m^{2}V^{-1}s^{-1} e la conducibilita' σ(600)= 83 Ω^{-1}m^{-1}.
Si chiede di determinare:
1) la concentrazione dei portatori intrinseci a temperatura ambiente;
2) il valore della gap ottica del materiale, supposta indipendente dalla temperatura fra 300 e 600 K, con la maggiore precisione possibile;
Supponiamo ora di drogare il materiale con soli donori di energia di legame ε_D=0.015 eV in concentrazione N_D = 7x10^{18} cm^{-3}.
3) Determinare se il semiconduttore e' degenere o meno a T=0, ossia tale che sia avvenuta la transizione di Mott. Sono note la costante dielettrica relativa del materiale ε_r = 12 e le formule per energia di legame e raggio di Bohr della impurezza riportate in calce (si suppone valido il modello idrogenoide).

$$\sigma = q(n\mu_e + p\mu_h); \qquad R_H = \frac{-1}{q}\frac{n\mu_e^2 - p\mu_h^2}{(n\mu_e + p\mu_h)^2} \qquad \text{nel sistema SI (MKQS)}$$

$$E_n = \frac{m_e^*}{m_0}\frac{1}{\varepsilon_r^2}\frac{1}{n^2}R; \qquad a_n = \frac{m_0}{m_e^*}\varepsilon_r n^2 a_B; \qquad R = 13.6\ eV; \qquad a_B = 0.05nm$$

Esercizio 1-Soluzione

Soluzione.

1. Poiche’ la relazione di dispersione è lineare, i neutroni sondano la banda acustica, triplamente degenere in quanto indipendente dalla direzione dell’impulso:

$\omega = 2\times 10^5 k = v_s k$, quindi $v_s = 2\times 10^5$ cm/s

La costante C si ricava dal valore di $\omega_{acustica}$ a bordo zona

$$C = \frac{M_1 \omega^2_{acustica}}{2} = \frac{4{,}5\times 10^{-23}\times(12\times 10^{12})^2}{2} = 3240 \text{ dyne/cm}$$

L’assorbimento evidenzia invece il modo ottico triplamente degenere a k = 0, da cui si ricavano la massa M_2 e la densità:

$$\omega_{ottica} = \tilde{\nu}_0\cdot 2\pi c = \sqrt{2C\left(\frac{1}{M_1}+\frac{1}{M_2}\right)}$$

$$\frac{1}{M_2} = \frac{(\tilde{\nu}_0\cdot 2\pi c)^2}{2C} - \frac{1}{M_1} = \frac{(155\times 2\pi\times 3\times 10^{10})^2}{6480} - \frac{1}{4{,}5\times 10^{-23}} = 1{,}315\times 10^{23} - 0{,}222\times 10^{23} = 1{,}09\times 10^{23}\ g^{-1}$$

$$M_2 = 0{,}91\times 10^{-23} \text{ g}$$

La densità è pertanto

$$\rho = \frac{M_1+M_2}{a^3} = \frac{(4{,}50+0{,}91)\times 10^{-23}}{(2\times 10^{-8})^3} = 6{,}8 \text{ g/cm}^3$$

2.

$$\int_0^{\omega_D} \frac{V\omega^2}{2\pi^2 v_s^3} d\omega = nV;$$

$$T_D = \frac{\hbar\omega_D}{k_B} = \frac{\hbar}{k_B}\omega_D = \frac{\hbar}{k_B} v_s \left(\frac{6\pi^2 nV}{V}\right)^{1/3} = \frac{\hbar v_s}{k_B}\frac{2^{1/3}}{a}\left(6\pi^2\right)^{1/3}$$

$$= \frac{1.05\times 10^{-27}\times 2\times 10^5}{1{,}38\times 10^{-16}}\times\frac{2^{1/3}}{2\times 10^{-8}}\times 3{,}9 = 373{,}6 \text{ K}$$

$$C/M = \frac{1}{\rho}\frac{12\pi^4}{5}\frac{2}{a^3}k_B\left(\frac{10}{373{,}6}\right)^3 = \frac{12\pi^4\times 1{,}38\times 10^{-16}\times 2}{6{,}7\times 5\times(2\times 10^{-8})^3}\times 1{,}915\times 10^{-5} = 2{,}3\times 10^4 \text{ erg/gK}$$

3.

$$T_E = \frac{hc\nu_0}{k_B} = \frac{6{,}62\times 10^{-27}\times 3\times 10^{10}\times 155}{1{,}38\times 10^{-16}} = 223 \text{ K}$$

Quindi T è maggiore sia della temperatura di Einstein che della temperatura di Debye. Si può usare il limite classico con 6 gradi di libertà:

$$C/M = \frac{1}{\rho}6n\frac{k_B}{2} = \frac{1}{\rho}3\frac{2}{a^3}k_B = \frac{6\times 1{,}38\times 10^{-16}}{6{,}7\times(2\times 10^{-8})^3} = 1.54\times 10^7 \text{ erg/gK}$$

Esercizio 2 - Soluzione

1) Nel caso intrinseco valgono le

$$\sigma = q\left(n\mu_e + p\mu_h\right) = qn_i\left(\mu_e + \mu_h\right)$$

$$R_H = \frac{-1}{q}\frac{n\mu_e^2 - p\mu_h^2}{\left(n\mu_e + p\mu_h\right)^2} = \frac{-1}{qn_i}\left(\frac{\mu_e - \mu_h}{\mu_e + \mu_h}\right)$$

da cui si ricava

$$\sigma(300)R_H(300) = \left[\mu_h(300) - \mu_e(300)\right] = 4.5\times10^{-4}\times(-2.35\times10^{2}) = -1.058\times10^{-1}\ \mathrm{m^2V^{-1}s^{-1}} \quad \text{e}$$

$$\mu_h(300) = \left[\mu_h(300) - \mu_e(300)\right] + \mu_e(300) = -0.1058 + 0.15 = 0.0442\ \mathrm{m^2V^{-1}s^{-1}}$$

$$n_i(300) = \frac{\sigma(300)}{q\left[\mu_e(300) + \mu_h(300)\right]} = \frac{4.5\times10^{-4}}{1.6\times10^{-19}\times0.1942} = 1.45\times10^{16}\ m^{-3}$$

2) Analogamente si ha

$$n_i(600) = \frac{\sigma(600)}{q\left[\mu_e(600) + \mu_h(600)\right]} = \frac{83}{1.6\times10^{-19}\times0.052} = 1\times10^{22}\ m^{-3} \quad \text{e ricordando che } n_i(T) = CT^{3/2}e^{-\frac{E_G}{2k_BT}}$$

si ottiene $\dfrac{1\times10^{22}}{1.45\times10^{16}} = n_i(600)/n_i(300) = \left(600/300\right)^{3/2} e^{-\frac{E_G}{2k_B}\left(\frac{1}{600}-\frac{1}{300}\right)} = 2^{3/2}e^{-\frac{E_G}{2k_B}\left(\frac{-1}{600}\right)}$

$$0.69\times10^{6} = 2^{3/2}e^{-\frac{E_G}{2k_B}\left(\frac{-1}{600}\right)}; \qquad \frac{E_G}{k_B} = 1200\ln\left(\frac{0.69\times10^{6}}{2^{3/2}}\right) = 14885\ K; \qquad E_G = 14885/11605 = 1.283\ eV$$

3) Il semiconduttore e' degenere a T=0 se la densita' dei donori e' superiore a quella caratteristica per la transizione isolante-metallo, ossia alla concentrazione per la quale il raggio di Bohr dello stato fondamentale dell'impurezza porti a una sovrapposizione fra funzioni d'onda di impurezze prime vicine

$$N_D \geq N_{IMT} = \left(\frac{4}{3}\pi a_0^3\right)^{-1}$$

Bisogna pertanto per prima cosa determinare il raggio di Bohr per lo stato fondamentale dell'impurezza. Si osservi che dalle formule date per l'energia di legame e il raggio della impurezza nei suoi vari stati si ottiene, per qualsiasi stato eccitato e quindi anche per il fondamentale,

$$E_n a_n = E_0 a_0 = \varepsilon_D a_0 = \frac{1}{\varepsilon_r} R a_B$$

$$a_0 = \frac{1}{\varepsilon_D \varepsilon_r} R a_B = \frac{13.6}{12\times15\times10^{-3}} 5\times10^{-11} = 3.77\times10^{-9}\, m$$

da cui si ricava

$$N_{IMT} = \left(\frac{4\pi a_0^3}{3}\right)^{-1} = \left(\frac{4\times3.14\times53.9\times10^{-27}}{3}\right)^{-1} = 4.43\times10^{24}\, m^{-3} < N_D \text{ : il semiconduttore e' degenere.}$$

e pertanto il semiconduttore e' degenere in quanto N_D=7x10^{24} m^{-3}.