

FISICA DELLA MATERIA CONDENSATA

Proff. P. Calvani e M. Capizzi

Prova scritta del 10 febbraio 2010

Problema 1

Un semiconduttore di volume $V = 1 \text{ cm}^3$ ha una struttura cubica a corpo centrato con base monoatomica, una temperatura di Debye $T_D = 75 \text{ K}$, una costante dielettrica relativa $\epsilon_r = 11$ ed è drogato con N_d donori.

Calcolare:

- a) il contributo vibrazionale alla capacità termica del semiconduttore a volume costante C_v^{vib} a $T = 5 \text{ K}$, sapendo che il lato della cella cubica è $2,5 \times 10^{-8} \text{ cm}$;
- a) il numero di donori N_d , sapendo che la massa efficace degli elettroni è $m = 0,01 m_e$ e che a $10N_d$ si avrebbe una transizione metallo-isolante di Mott a $T = 0$ (alla quale gli orbitali sferici degli elettroni intorno alle impurezze prime vicine vengono a contatto);
- a) il contributo elettronico alla capacità termica a 5 K sapendo che

$$C_v^{el} = 0,2T \cdot N_e \text{ erg/K}$$

dove N_e è il numero di elettroni in banda di conduzione e che si può assumere

$$N_e \cong N_d \exp(-\epsilon_d / k_B T)$$

dove ϵ_d è l'energia di ionizzazione dei donori.

Si discutano brevemente tutte le approssimazioni utilizzate.

Si ricorda che:

- il contributo vibrazionale di ogni branca acustica alla capacità termica è

$$C_v^{vib} = \frac{4\pi^4}{5} N k_B \left(\frac{T}{T_D} \right)^3$$

dove N è il numero di atomi del campione;

- il raggio dell'orbita idrogenoide nello stato n è

$$r_n = n^2 \frac{\epsilon \hbar^2}{m e^2}$$

- i livelli energetici dell'atomo idrogenoide sono

$$\varepsilon_n = -\frac{me^4}{2n^2\hbar^2\varepsilon^2}$$

$\varepsilon_0 = 1$ (unità cgs); $\hbar = 1,05 \times 10^{-27}$ erg · s; $e = 4,8 \times 10^{-10}$ u. cgs; $m_e = 9,1 \times 10^{-28}$ g;
 $k_B = 1,38 \times 10^{-16}$ erg/K

Soluzione

a) Le 3 bande acustiche danno un contributo fononico a C_v pari a

$$C_v^{vib} = \frac{12\pi^4}{5} \left(\frac{2}{a^3} \cdot 1\right) k_B \left(\frac{T}{T_D}\right)^3 = 234 \frac{2 \times 1,38 \times 10^{-16}}{(2,5 \times 10^{-8})^3} \left(\frac{5}{75}\right)^3 = 1,2 \times 10^6 \text{ erg/K}$$

b) Per trovare il numero di donori N_d bisogna imporre la condizione di Mott

$$10N_d = \left(\frac{4}{3}\pi r_0^3\right)^{-1}$$

Il raggio dell'orbita a $T=0$ è quello dello stato fondamentale, che si può anche scrivere

$$r = r_0 \left(\frac{\varepsilon}{m_e^*/m_e}\right) = 0,53 \times 10^{-8} \left(\frac{11}{0,01}\right) = 5,8 \times 10^{-6} \text{ cm}$$

da cui si ricava

$$N_d = \frac{3}{40\pi \cdot (5,8 \times 10^{-6})^3} = 1,2 \times 10^{14}$$

c) Si trova dapprima l'energia di ionizzazione ponendo $n = 1$ nella formula

$$\varepsilon_n = \frac{2,2 \times 10^{-11}}{n^2} \left(\frac{m_e^*}{m_e \varepsilon^2}\right) = 2,2 \times 10^{-11} \left(\frac{0,01}{11^2}\right) = 1,8 \times 10^{-15} \text{ erg};$$

Di qui

$N_e \cong N_d \exp(-\varepsilon_d / k_B T) = 1,2 \times 10^{14} \exp(-1,8 \times 10^{-15} / 1,38 \times 10^{-16} \times 5) = 1,2 \times 10^{14} \times 0,073 = 8,9 \times 10^{12}$
e infine

$$C_v^{el} = 0,2T \cdot N_e = 0,2 \times 5 \times 8,9 \times 10^{12} = 8,9 \times 10^{12} \text{ erg/K}$$

Le approssimazioni utilizzate sono quelle del modello di Debye e l'assunto che il numero di portatori intrinseci a 5 K sia trascurabile.

Problema 2

Un reticolo bidimensionale a pianta rettangolare contiene $N_b = 2 \times 10^7$ file atomiche dirette lungo x , separate l'una dall'altra da una distanza $b = 1,5$ Å. Ogni fila è fatta di $N_a = 10^7$ atomi monovalenti con parametro reticolare $a = 2,5$ Å. Il potenziale cristallino a cui sono soggetti gli elettroni quasi liberi è

$$U = -U_1 \cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right) - U_2 \cos\left(\frac{2\pi}{b}y\right)$$

con $U_1 = 2$ eV e $U_2 = 1$ eV.

a) Disegnare la prima zona di Brillouin (ZB) nel piano k_x, k_y indicando i rispettivi valori di k ai bordi di ZB nelle direzioni $(1,0)$ e $(0,1)$ e calcolandone il valore numerico.

Trovare inoltre i valori delle gap di energia ai bordi della ZB nelle stesse direzioni.

b) Trovare la densità degli stati $\rho(k)$.

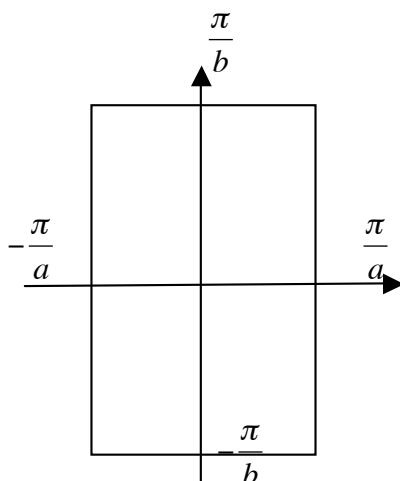
c) Trovare il valore di k_F , disegnare in ZB il cerchio di Fermi di raggio k_F e specificare se, entro le approssimazioni del calcolo, il solido è un isolante, un metallo o un metallo anisotropo (cioè in una sola direzione).

Soluzione

a) I vettori del reticolo reciproco che modulano il potenziale sono

$$G_a = \frac{2\pi}{a}; \quad G_b = \frac{2\pi}{b}$$

La ZB è dunque



A bordo zona

$$k_x = \pm \frac{\pi}{a} = \pm 1,3 \times 10^8 \text{ cm}^{-1}; \quad k_y = \pm \frac{\pi}{b} = \pm 2,1 \times 10^8 \text{ cm}^{-1}$$

Le gap di energia per questi valori di k sono le ampiezze dei termini del potenziale periodico, cioè rispettivamente

$$U_1 = 2 \text{ eV}; \quad U_2 = 1 \text{ eV}$$

b) Le condizioni cicliche al contorno producono nelle direzioni x e y , rispettivamente, uno stato ogni

$$\frac{2\pi}{N_a a}; \quad \frac{2\pi}{N_b b}$$

Pertanto la densità degli stati nella ZB, tenendo conto della degenerazione di spin, è

$$\rho(k) = 2 \frac{N_a N_b ab}{(2\pi)^2} = \frac{2 \times 10^7 \times 2 \times 10^7 \times 2,5 \times 10^{-8} \times 1,5 \times 10^{-8}}{(2\pi)^2} = \frac{0,15}{(2\pi)^2} = 3,8 \times 10^{-3} \text{ cm}^2$$

c) Il vettore d'onda di Fermi si ottiene imponendo

$$\rho(k) \pi k_F^2 = N_a N_b; \quad 2 \frac{N_a N_b ab}{(2\pi)^2} \pi k_F^2 = N_a N_b$$
$$k_F = \sqrt{\frac{2\pi}{ab}} = 1,3 \times 10^8 \text{ cm}^{-1}$$

Confrontando questo risultato con i valori di k a bordo zona ottenuti al punto a), si osserva che la banda nella direzione $(1,0)$ è piena, mentre nella direzione $(0,1)$ è semipiena. Pertanto il solido è un metallo anisotropo.