Corso di Materia condensata

Prova scritta individuale del 11-9-2013

Proff. P. Calvani e M. Capizzi

Esercizio 1

Un semiconduttore drogato con una densità di donori $N_D = 0{,}02 N_M$, dove N_M è la densità critica per la transizione di Mott, ha una costante dielettrica relativa $\varepsilon_r = 10$. Inoltre $\varepsilon_g = 25\,\varepsilon_d$, dove ε_g è l'energia della gap e ε_d l'energia di legame dei donori. A T =10 K gli elettroni hanno un tempo medio di scattering $\tau_e(10) =$ 2,40x10^{-12} s e una mobilità μ_e = 5,20 m^2/Vs; la massa efficace delle lacune, indipendente dalla temperatura, è uguale a quella degli elettroni.

1. Trovare la densità n di elettroni liberi a 10 K
2. Determinare la conducibilità elettrica del semiconduttore a 10 K.
3. Il semiconduttore viene riscaldato fino a T = 300 K. Determinare il numero dei portatori di entrambi i segni a questa temperatura e discutere la validità delle formule utilizzate a tal fine.

   $\varepsilon_d = 13{,}6 m_e^* / \varepsilon_r^2$ eV ; $r_d = a_0 \varepsilon_r / m_e^*$($a_0 = 0{,}54 \times 10^{-10}$ m) dove m_e^*= massa efficace degli elettroni in unità di masse elettroniche); $n = \sqrt{N_c N_D}\exp(-\varepsilon_d / 2k_B T)$ con $N_C = 2\left(\dfrac{m_e m_e^* k_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}$.

   Inoltre, e =1,6×10^{-19} C; k_B=1,381×10^{-23} J K^{-1}; $\hbar$ =1,054×10^{-34} J •s; m_e = 9,10×10^{-31} kg;

   1 eV equivale a 11605 K.

Esercizio 2

Lo stagno cristallizza in una struttura FCC con parametro di cella, misurato a 0K, a_0 = 6.384Å. E' noto che la temperatura di Debye dello stagno è Θ_D = 260K, che il parametro reticolare si espande secondo la legge $a(T) = a_0(1 + \alpha T)$, che si assume valere sino a 1000K.

1. Calcolare il coefficiente di dilatazione α, con la massima precisione consentita dai dati, sapendo che la velocità del suono nello stagno è v_s = 3527 m/s a T = 150 K.

2. Calcolare la capacità termica reticolare per unità di volume a 50 e 500 K.

$k_B = 1.381 \times 10^{-23}\,JK^{-1}$; $\hbar = 1.054 \times 10^{-34}\,Js$; $c_v^{ph}(Debye) = \dfrac{12\pi^4}{5}\left(\dfrac{T}{\Theta_D}\right)^3 nk_B$; $\pi = 3.142$

Soluzioni

Esercizio 1

1. Nell'ipotesi $\varepsilon_g = 25\,\varepsilon_d$, a 10 K si può trascurare il ruolo dei portatori intrinseci. Dalla mobilità

$$\mu_e(10) = \frac{e\tau(10)}{m_e m_e^*}$$

si ricava

$$m_e m_e^* = \frac{e\tau}{\mu_e} = \frac{1{,}60\times10^{-19}\times2{,}40\times10^{-12}}{5{,}20} = 0{,}74\times10^{-31}\ \text{kg}$$

$$m_e^* = 0.081$$

Quindi

$$N_c(10) = 2\left(\frac{m_e m_e^* k_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} = 2\left(\frac{0{,}74\times10^{-31}\times1{,}38\times10^{-23}\times10}{2\pi\times\left(1{,}05\times10^{-34}\right)^2}\right)^{3/2} = 3{,}58\times10^{21}\ \text{m}^{-3}$$

e $r_d = \dfrac{a_0\varepsilon_r}{m_e^*} = \dfrac{10\times0{,}54\times10^{-10}}{0{,}081} = 6{,}7\times10^{-9}$ m

Poiché la densità critica per la transizione di Mott è

$$N_M = \left(\frac{4}{3}\pi r_d^3\right)^{-1} = \frac{3}{4\pi\times\left(6{,}7\times10^{-9}\right)^3} = 7{,}9\times10^{23}\ \text{m}^{-3}$$

$$N_D = 1{,}6\times10^{22}\ \text{m}^{-3}$$

Infine

$$\varepsilon_d = 13{,}6 m_e^*/\varepsilon_r^2 = \frac{13{,}6\times0{,}081}{100} = 11\ \text{meV}$$

Perciò

$$n = \sqrt{N_c N_D}\exp(-\varepsilon_d/2k_BT) = \sqrt{3{,}58\times10^{21}\times1{,}6\times10^{22}}\exp(-0{,}011\times11605/20) =$$

$$= 7{,}55\times10^{21}\times0{,}0017 = 1{,}28\times10^{19}\ \text{m}^{-3}$$

Quindi

2. $\sigma(10K) \cong qn\mu_e = 1{,}60\times10^{-19}\times1.28\times10^{19}\times5{,}20 = 10.6\ \Omega^{-1}\text{m}^{-1}$

3. Poiché le masse dell'elettrone e della lacuna sono supposte uguali e

$\mu = 0{,}5E_g + 0{,}75k_BT\ln\left(m_h^*/m_e^*\right),$

il potenziale chimico non si sposta passando da 10 K a 300 K e la ipotesi di non degenerazione (potenziale chimico nella gap, distante più di k_BT dal fondo della banda di conduzione o dalla cima della banda di valenza) che è alla base della formula per la densità dei portatori intrinseci

$$n_i(300) = \sqrt{N_C N_V}\, e^{-\frac{\varepsilon_g}{2k_BT}} = N_c(10)\left(\frac{300}{10}\right)^{3/2} e^{-\frac{\varepsilon_g}{2k_BT}} = 3{,}58\times10^{21}\times\left(\frac{300}{10}\right)^{3/2}\times\exp\left(-\frac{25\times0{,}011\times11605}{600}\right) =$$

$$= 3{,}58\times10^{21}\times1{,}64\times10^{2}\times0{,}0049 = 2{,}9\times10^{21}\ \mathrm{m}^{-3}$$

resta valida.

Dall'equazione di neutralità di carica

$$p + N_d^+ - n = 0$$

si ricava, assumendo che tutti i donori siano ionizzati,

$$n = \frac{N_D}{2} + \sqrt{\left(\frac{N_D}{2}\right)^2 + n_i^2} = 8{,}0\times10^{21} + \sqrt{64\times10^{42} + 8{,}4\times10^{42}} = 1{,}65\times10^{22}\ \mathrm{m}^{-3}$$

Inoltre

$$p = \frac{n_i^2}{n} = \frac{8{,}4\times10^{42}}{1{,}65\times10^{22}} = 5{,}1\times10^{20}\ /\mathrm{m}^3$$

Esercizio 2

1. Ricordando che

$$\frac{4\pi}{3}K_D^3 / \left(\frac{2\pi}{L}\right)^3 = N \quad\Rightarrow\quad K_D = \sqrt[3]{6\pi^2 n}; \qquad \hbar v_s K_D = \hbar\omega_D = k_B\Theta_D$$

(con $n = 4/a^3$ per una struttura FCC), si ottiene

$$3527 = v_s(150) = \frac{k_B\Theta_D}{\hbar K_D} = \frac{k_B\Theta_D}{\hbar}\frac{a(150)}{\sqrt[3]{6\times4\times\pi^2}}$$

$$a(150) = 3527\times\sqrt[3]{6\times4\times\pi^2}\times\frac{1.054\times10^{-34}}{1.381\times10^{-23}\times260} = 3527\times6.188\times2.935\times10^{-14} = 6.406\times10^{-10}\,m$$

Poiché

$$a(150) = a(0)(1 + \alpha T)$$

si ha

$$\alpha = \frac{1}{150}\left[\frac{a(150)}{a(0)} - 1\right] = \frac{1}{150}\left[\frac{6.406}{6.384} - 1\right] = 2{,}297 \times 10^{-5} K^{-1}$$

2. Nell'utilizzare la formula di Debye, valida a 50 K < Θ_D, si dovrà tenere conto della variazione con la temperatura del parametro reticolare e, quindi, della densità.

$$c_v^{ph}(50) = \frac{12\pi^4}{5}\left(\frac{50}{\Theta_D}\right)^3 \frac{4}{\left[6.384 \times 10^{-10} \times (1 + 2{,}29 \times 10^{-5} \times 50)\right]^3} 1.381 \times 10^{-23} =$$

$$= 233.8 \times 7.112 \times 10^{-3} \frac{4}{2.611 \times 10^{-28}} 1.381 \times 10^{-23} = 3{,}516 \times 10^5 JK^{-1}m^{-3}$$

mentre a 500 K > Θ_D si ha

$$c_v^{ph}(500) = 3nk_B = 3 \frac{4}{\left[6.384 \times 10^{-10} \times (1 + 2{,}29 \times 10^{-5} \times 500)\right]^3} 1.381 \times 10^{-23} =$$

$$= 3 \times 1.486 \times 10^{28} \times 1.381 \times 10^{-23} = 6.156 \times 10^5 JK^{-1}m^{-3}$$