Prova scritta di Materia Condensata ed Elettronica dei Dispositivi a Stato Solido

del 13 Luglio 2010

Proff. Paolo Calvani e Mario Capizzi

1º Esercizio

Il solido A è un metallo monoatomico e monovalente, con un reticolo cubico a facce centrate con lato del cubo $a = 1.5$ Å; ha una densità $\rho = 6,5$ g/cm^3, una temperatura di Debye $T_D = 150$ K e una temperatura di Fermi $T_F = 10000$ K.

1. Calcolare il contributo fononico alla capacità termica *per unità di massa* a volume costante, C'_v, a 30 K e a 700 K.
2. Valutare l'ordine di grandezza del contributo degli elettroni di conduzione a C_v a T = 30 K.
3. Il solido B ha lo stesso reticolo cristallino e la stessa T_D di A, ma una base che, anziché essere monoatomica, è fatta di 2 atomi di massa uguale a quelli di A. Discutere se il contributo reticolare a 30 K è diverso da quello trovato al punto 1 e, se sì, di quanto.

Si ricorda che

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

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

dove N è il numero di atomi e V il volume del campione;

- assumere che il contributo alla capacità termica degli elettroni liberi sia approssimativamente

$$c_v^{el} \approx \frac{3}{2}\frac{n}{V}k_B$$

dove n è la frazione di elettroni quantisticamente eccitabili.

[$k_B = 1,38\times10^{-16}$ erg/K; $h = 6.6\times10^{-27}$ erg s; $c = 3.0\times10^{10}$ cm/s]

2º Esercizio

In un reticolo bidimensionale rettangolare di costanti reticolari a_1 e a_2 e' posto un atomo per cella con un elettrone di valenza di tipo *s*.

1) Disegnato il reticolo, indicare a quali vettori di traslazione *R* sono associati i tre integrali di trasferimento γ_1, γ_2, e γ_3 corrispondenti ai termini della serie piu' importanti nell'espressione della banda in approssimazione tight-binding

$$\varepsilon(\bar{k}) = E_0^{'} - \sum_{\bar{R}\neq 0}\gamma(\bar{R})e^{i\bar{k}\cdot\bar{R}}$$

ove $\gamma(\bar{R}) = -\int\psi_s^*(\bar{r})\Delta V(\bar{r})\psi_s(\bar{r}-\bar{R})d\bar{r}$, ΔV e' il potenziale del reticolo e si sono trascurati gli integrali di sovrapposizione.

Si scriva poi esplicitamente l'espressione di $\varepsilon(k)$.

2) Si specifichi il segno di γ_1, γ_2, e γ_3 e si determini l' ampiezza della banda (differenza fra massimo e minimo assoluto) nel piano k_x,k_y.

3) Infine si calcolino i valori della mobilita' nelle direzioni *x* e *y* per un elettrone a *k*=0.

a_1=0.1 nm; a_2=0.115 nm; $|\gamma_1|$=1eV; $|\gamma_2|$=0.5eV; $|\gamma_3|$=0.1eV; tempo di rilassamento $\tau=10^{-13}$ s

Soluzioni

1° esercizio

1. Il contributo fononico per unità di volume a 30 K (T << T_D) è, per le tre branche acustiche,

$$C_v^{vib}(30\,\mathrm{K}) = 3\frac{4\pi^4}{5}\left(\frac{4}{a^3}\cdot 1\right)k_B\left(\frac{T}{T_D}\right)^3 = 234\frac{4\times 1{,}38\times 10^{-16}}{(1{,}5\times 10^{-8})^3}\left(\frac{30}{150}\right)^3 = 3{,}06\times 10^8 \text{ erg/cm}^3\text{K}$$

in quanto si hanno quattro atomi per cella unitaria. Il contributo per unità di massa è

$$C_v'^{vib}(30\text{ K}) = \frac{C_v^{vib}}{\rho} = \frac{3{,}06\times 10^8}{6{,}5} = 4{,}7\times 10^7 \text{ erg/gK}$$

A 700 K il contributo fononico (T >> T_D) non si può calcolare con il modello di Debye ma vale l'approssimazione classica:

$$C_v'^{vib}(700\,\mathrm{K}) = \frac{C_v^{vib}(700\,\mathrm{K})}{\rho} = \frac{3Nk_B}{V}\frac{1}{\rho} = \frac{3\times 4\cdot k_B}{a^3}\frac{1}{\rho} = \frac{12\cdot 1{,}38\times 10^{-16}}{(1{,}5\times 10^{-8})^3\times 6{,}5} = 7{,}5\times 10^7 \text{ erg/gK}$$

2. Gli elettroni eccitabili sono quelli che distano meno di $k_B T$ dalla superficie di Fermi; dunque

$$n \approx \frac{T}{T_F}N$$

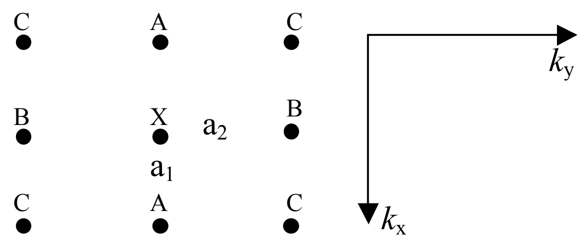
Poiché il metallo è monovalente,

$$c_v^{'el}(30\,\mathrm{K}) \approx 3\frac{T}{T_F}\frac{N}{V}k_B\frac{1}{\rho} \approx 3\frac{30}{10^4}\frac{4}{a^3}k_B\frac{1}{6.5} = 0{,}036\frac{1{,}4\times 10^{-16}}{(1{,}5)^3\times 10^{-24}}\frac{1}{6.5} \approx 2{,}3\times 10^5 \text{ erg/gK}$$

3. Con 2 atomi per cella elementare il calore specifico reticolare raddoppia, in base al modello di Debye, dato che N è il numero totale di atomi nel reticolo.

2° esercizio

1) Sia



e $\varepsilon(\bar{k}) = E_0^{'} - \sum_{\bar{R}\neq 0} \gamma(\bar{R}) e^{i\bar{k}\cdot\bar{R}}$, con

γ_1= interazione X-A

γ_2= interazione X-B

γ_3= interazione X-C

Si ha

$$E(k) = E_0^{'} - \gamma_1\left(e^{ik_x a_1} + e^{-ik_x a_1}\right) - \gamma_2\left(e^{ik_y a_2} + e^{-ik_y a_2}\right) - \gamma_3\left(e^{ik_x a_1 + ik_y a_2} + e^{-ik_x a_1 - ik_y a_2} + e^{ik_x a_1 - ik_y a_2} + e^{-ik_x a_1 + ik_y a_2}\right) =$$

$$E_0^{'} - 2\gamma_1 \cos(k_x a_1) - 2\gamma_2 \cos(k_y a_2) - 2\gamma_3\left[\cos(k_x a_1 + k_y a_2) + \cos(k_x a_1 - k_y a_2)\right] =$$

$$= E_0^{'} - 2\gamma_1 \cos(k_x a_1) - 2\gamma_2 \cos(k_y a_2) - 4\gamma_3 \cos(k_x a_1)\cos(k_y a_2)$$

2) Essendo

$$\gamma(\bar{R}) = -\int \psi^*_{p_y}(\bar{r}) \Delta V(\bar{r}) \psi_{p_y}(\bar{r} - \bar{R}) d\bar{r}$$

il segno di γ_1, γ_2, e γ_3 e' positivo in quanto il potenziale cristallino e' negativo per definizione, se il cristallo si forma.

Per determinare l'ampiezza della banda cerchiamo il massimo e minimo assoluti dell'energia:

$$\frac{\partial E(k)}{\partial k_x} = +2\gamma_1 a_1 \sin(k_x a_1) + 4\gamma_3 a_1 \sin(k_x a_1)\cos(k_y a_2) = 2a_1 \sin(k_x a_1)\left[\gamma_1 + 2\gamma_3 \cos(k_y a_2)\right] = 0$$

$$\frac{\partial E(k)}{\partial k_y} = +2\gamma_2 a_2 \sin(k_y a_2) + 4\gamma_3 a_2 \sin(k_y a_2)\cos(k_x a_1) = 2a_2 \sin(k_y a_2)\left[\gamma_2 + 2\gamma_3 \cos(k_x a_1)\right] = 0$$

Il sistema di due equazioni si annulla per

$$k_x = k_y = 0 \qquad k_x = \pm\frac{\pi}{a_1}; \quad k_y = \pm\frac{\pi}{a_2}$$

Sostituendo nella energia si trova che il minimo assoluto si ha per

$$k_x = k_y = 0 \qquad E(k) = E_0^{'} - 2\gamma_1 - 2\gamma_2 - 4\gamma_3 = E_0^{'} - 3.4\,eV$$

il massimo per

$$k_x = \pm\frac{\pi}{a_1}; \quad k_y = \pm\frac{\pi}{a_2} \qquad E(k) = E_0^{'} + 2\gamma_1 + 2\gamma_2 - 4\gamma_3 = E_0^{'} + 2.6\,eV$$

Per cui l'ampiezza di banda e' di 6 eV.

3) Per determinare la mobilita' $\mu = \dfrac{e\tau}{m*}$ noto il tempo di scattering τ, devo determinare la massa efficace *m** a *k*=0 nelle due direzioni, per cui

$$m_x^*(k_x = 0) = \left(\frac{1}{\hbar^2}\frac{\partial^2 E(k)}{\partial k_x^{\ 2}}\right)^{-1}_{k_x=0} = \frac{\hbar^2}{2a_1^2(\gamma_1 + 2\gamma_3)} = \frac{\left(1.05\times10^{-34}\right)^2}{2\times\left(1\times10^{-10}\right)^2\times\left(1+2\times0.1\right)\times1.6\times10^{-19}} = 2.87\times10^{-30}\,kg$$

$$m_y^*(k_y = 0) = \left(\frac{1}{\hbar^2}\frac{\partial^2 E(k)}{\partial k_y^{\ 2}}\right)^{-1}_{k_y=0} = \frac{\hbar^2}{2a_2^2(\gamma_2 + 2\gamma_3)} = \frac{\left(1.05\times10^{-34}\right)^2}{2\times\left(1.15\times10^{-10}\right)^2\times\left(0.5+2\times0.1\right)\times1.6\times10^{-19}} = 3.72\times10^{-30}\,kg$$

e

$$\mu_x(k=0) = \frac{e\tau}{m*} = \frac{1.62\times10^{-19}\times10^{-13}}{2.87\times10^{-30}} = 5.64\times10^{-3}\,V^{-1}m^2s^{-1}$$

$$\mu_y(k=0) = \frac{e\tau}{m*} = \frac{1.62\times10^{-19}\times10^{-13}}{2.17\times10^{-30}} = 4.35\times10^{-3}\,V^{-1}m^2s^{-1}$$