Corso di Materia condensata

Prova scritta del 14-2-12

Proff. P. Calvani e M. Capizzi

Esercizio 1

Un ipotetico elemento –che cristallizza nella struttura cubica semplice con parametro reticolare a = 0,18 nm– ha tre elettroni di valenza, dei quali due occupano un orbitale p_z e uno occupa un orbitale s. Utilizzando l'approssimazione di legame forte limitata ai primi vicini, nella forma

$$E_i(\bar{k}) = E_i - \alpha_i - \sum_{\bar{R}\in p.v.} \gamma_{i,\bar{R}} e^{-i\bar{k}\cdot\bar{R}} \qquad (i \equiv p,s)$$

dove $\gamma_{i,\bar{R}}$ è l'integrale di hopping, $E_p - \alpha_p$ = -4,2 eV, $E_s - \alpha_s$= +1,0 eV, $|\gamma_p|$ =0,8 eV, $|\gamma_s|$ = 0,6 eV,

1) scrivere l'espressione esplicita di $E_i(\bar{k})$ per le due bande di energia;
2) trovare i valori della gap interbanda E_g e la massa efficace degli elettroni di conduzione al punto $\Gamma \equiv (0,0,0)$ dello spazio $\vec{k}$ e, lungo la direzione (1,1,1), il modulo della velocita' $\vec{v}_g$ nel punto $\Pi \equiv \left(\frac{\pi}{a},\frac{\pi}{a},\frac{\pi}{a}\right)$;
3) utilizzando il modello dell'elettrone quasi libero e assumendo una massa efficace isotropa e pari alla massa dell'elettrone libero m_0, trovare i valori della velocità di Fermi v_F e della conducibilità elettrica quando il cammino libero medio è $\lambda = 1{,}5 \times 10^{-8}$ m.

$k_F = \left(3\pi^2 \frac{N}{V}\right)^{\frac{1}{3}}$ dove N/V è la densità di elettroni liberi;

$m_0 = 9{,}1 \times 10^{-31}$ kg; $\hbar = 1.05 \times 10^{-34}$ J$\cdot$s ; $e = 1{,}6 \times 10^{-19}$ C .

Esercizio 2

L'arseniuro di gallio e' un semiconduttore con le seguenti caratteristiche a 300K:

μ_n=21 μ_p

N_C=4×10^{23} m^{-3}

N_V=8.1×10^{24} m^{-3}

E_G=1.42 eV

Determinare:

1) se il semiconduttore e' intrinseco o meno, ed eventualmente se di tipo n o p, sapendo che il coefficiente di Hall e' nullo a 300K;
2) la concentrazione di elettroni e lacune libere se eventuali impurezze (solo accettori o solo donatori) sono completamente ionizzate;
3) la posizione del potenziale chimico rispetto alla cima della banda di valenza;

4) Dimostrare che, nelle presenti ipotesi e se si assume che la mobilità sia indipendente dal drogaggio, il semiconduttore ha la stessa resistività se è intrinseco o drogato.

$R_H = -\frac{1}{qc}\frac{n\mu_n^2 - p\mu_p^2}{(n\mu_n + p\mu_p)^2}$; $\qquad j = q\left(n\langle v_n\rangle + p\langle v_p\rangle\right) \qquad p = N_V e^{-(\mu - E_V)/k_B T}$; $\qquad 1\,\text{eV} = 11605\ \text{K}$

Soluzioni

Esercizio 1

1) Nella banda *p* si ha $\gamma_p < 0$ nella direzione *z* e $\gamma_p > 0$ nelle direzioni *x, y*:

$$E_p(\bar{k}) = E_p - \alpha_p - 2\gamma_{px}\cos k_x a - 2\gamma_{py}\cos k_y a - 2\gamma_{pz}\cos k_z a =$$

$$= E_p - \alpha_p + 2|\gamma_p|\cos k_z a - 2|\gamma_p|\left(\cos k_x a + \cos k_y a\right) =$$

$$= -4{,}2 + 1{,}6\cos k_z a - 1{,}6\left(\cos k_x a + \cos k_y a\right)$$

Nella banda *s* si ha $\gamma_s > 0$ in tutte le direzioni:

$$E_s(\bar{k}) = E_s - \alpha_s - 2\gamma_{sx}\cos k_x a - 2\gamma_{sy}\cos k_y a - 2\gamma_{sz}\cos k_z a =$$
$$= E_s - \alpha_s - 2|\gamma_s|\left(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a\right) =$$
$$= 1{,}0 - 1{,}2\left(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a\right)$$

2) $E_g(\Gamma) = 1{,}0 - 1{,}2 \cdot 3 - (-4.2 + 1{,}6 - 3{,}2) = 3{,}2\ \text{eV}$;

Gli elettroni di conduzione sono solo in banda *s*, perché la banda p_z è piena. Le componenti del tensore massa efficace sono

$$m_{\alpha\beta} = \hbar^2 \left[\frac{\partial^2 E(\bar{k})}{\partial k_\alpha \partial k_\beta}\right]^{-1}$$

Nella banda *s* di un reticolo cubico il tensore è diagonale, e gli elementi diagonali sono tutti uguali al punto Γ (ma non agli altri punti della BZ) come si vede anche dalla formula della $E_s(\bar{k})$. Quindi

$$m^* = m_{xx} = m_{yy} = m_{zz} = \frac{\hbar^2}{2a^2|\gamma_s|\cos\left(k_j a\right)} = \qquad (j \equiv x, y, z)$$

$$m^*(\Gamma) = \frac{\hbar^2}{2a^2|\gamma_s|} = \frac{\left(1.05 \times 10^{-34}\right)^2}{2 \times \left(1{,}8 \times 10^{-10}\right)^2 \times 0{,}6 \times 1.6 \times 10^{-19}} = 1{,}8 \times 10^{-30}\, kg$$

Lungo la direzione (1,1,1) per ogni componente j della velocità di gruppo vale la relazione

$$v_{g\,j} = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial E}{\partial k_j} = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial}{\partial k_j}\left[E_s - \alpha_s - 2\gamma_s \cos\left(ak_j\right)\right] = \frac{2}{\hbar} a\gamma_s \sin\left(ak_j\right)$$

$$v_{g\,j}\left(\frac{\pi}{a}\right) = \frac{2}{\hbar} a\gamma_s \sin(\pi) = 0 \quad \Rightarrow \quad \left|\vec{v}_g\left(\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\right)\right| = 0$$

come prevedibile a bordo zona.

3) $k_F = \left(3\pi^2 \frac{N}{V}\right)^{\frac{1}{3}} = \left(3\pi^2\right)^{\frac{1}{3}} \frac{1}{a} = \frac{3{,}06}{1{,}8\times10^{-10}} = 1{,}7\times10^{10}\ \mathrm{m}^{-1}$

$$v_F = \frac{\hbar k_F}{m^*} = \frac{1.05\times10^{-34}\times1{,}7\times10^{10}}{9{,}1\times10^{-31}} = 2{,}0\times10^{6}\ \mathrm{m/s}$$

$$\tau = \frac{\lambda}{v_F} = \frac{1{,}5\times10^{-8}}{2{,}0\times10^{6}} = 7{,}5\times10^{-15}\ \mathrm{s}$$

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m^*} = \frac{1}{a^3}\frac{e^2\tau}{m^*} = \frac{\left(1{,}6\times10^{-19}\right)^2\times7{,}5\times10^{-15}}{\left(1{,}8\times10^{-10}\right)^3\times9{,}1\times10^{-31}} = 3{,}7\times10^{7}\ \Omega^{-1}m^{-1}$$

Esercizio 2

1)

$$R_H = -\frac{1}{qc}\frac{n\mu_n^2 - p\mu_p^2}{\left(n\mu_n + p\mu_p\right)^2} = 0$$

$$\frac{n}{p} = \left(\frac{\mu_p}{\mu_n}\right)^2 = \left(\frac{1}{21}\right)^2 = A$$

$$n = Ap$$

Poiché $p > 400n$ il semiconduttore è drogato e di tipo p.

2) Per la legge di azione di massa

$$np = n_i^2 = N_C N_V e^{-E_G/k_BT} = 4\times10^{23}\times8.1\times10^{24} e^{-\frac{11605\times1.42}{300}} = 4.51\times10^{24} m^{-6} = B$$

$$np = Ap^2 = B$$

$$p = \sqrt{\frac{B}{A}} = \sqrt{4.51}\times21\times10^{12} = 4.46\times10^{13} m^{-3}$$

$$n = \frac{n_i^2}{p} = \frac{4.51\times10^{24}}{4.46\times10^{13}} = 1.01\times10^{11} m^{-3}$$

3) Se si ha un solo tipo di impurezze (accettori nel nostro caso), e sono completamente ionizzate a 300 K, la concentrazione di lacune sarà determinata dai soli accettori (la concentrazione di lacune libere e’ ordini di grandezza piu’ bassa), per cui si avra’

$$p = N_a = 4.46\times10^{13}$$

e

$$p = N_V e^{-\frac{\mu - E_V}{k_B T}}$$

da cui segue

$$4.46\times10^{13} = 8.1\times10^{24} e^{-\frac{\mu - E_V}{k_B T}}$$

$$\mu - E_V = K_B T \times \ln\left(\frac{8.1\times10^{24}}{4.46\times10^{13}}\right) = \frac{300}{11605}\times 25.93 = 0.67\,\text{eV}$$

Si noti che il drogaggio p è sufficientemente basso da giustificare l'ipotesi che la mobilità non cambi rispetto al caso intrinseco (drogaggio nullo).

4)

$$j = q\left(n\langle v_n\rangle + p\langle v_p\rangle\right) = \frac{q\left(n\mu_n + p\mu_p\right)}{}E = \sigma E$$

$$\rho_{estr} = \sigma_{estr}^{-1} = \frac{1}{q\left(n\mu_n + p\mu_p\right)} = \frac{1}{qn\mu_n}\left(\frac{1}{1+\frac{p}{n}\frac{\mu_p}{\mu_n}}\right) = \frac{1}{qn\mu_n}\left(\frac{1}{1+\frac{1}{A}\sqrt{A}}\right) = \frac{1}{qn\mu_n}\frac{1}{22}$$

$$\rho_{\text{intr}} = \sigma_{\text{intr}}^{-1} = \frac{1}{q\left(n\mu_n + p\mu_p\right)} = \frac{1}{qn_i\mu_n}\left(\frac{1}{1+\frac{\mu_p}{\mu_n}}\right) = \frac{1}{qn_i\mu_n}\left(\frac{1}{1+\sqrt{A}}\right) = \frac{1}{qn_i\mu_n}\frac{21}{22}$$

$$\frac{\rho_{\text{estr}}}{\rho_{\text{intr}}} = \frac{1}{21}\frac{n_i}{n} = \frac{1}{21}\frac{\sqrt{4.51\times10^{24}}}{1.01\times10^{11}} = \frac{1}{21}\frac{2.12\times10^{12}}{1.01\times10^{11}} = 1$$