Esonero di Materia Condensata del 19 Gennaio 2010

Paolo Calvani – Mario Capizzi

Esercizio 1
Il rame è un metallo monovalente che cristallizza nella struttura cubica a facce centrate, con lato del cubo a, e ha una densità $d = 8920$ kg/m^3. La densità di elettroni di conduzione è $n_{el} = 8{,}47\times10^{28}$ /m^3.

a) Si trovino il parametro reticolare a e la massa atomica M (in kg) del rame.

b) L'energia interna per unità di massa del Cu si può scrivere

$$u(T) = \gamma T^2 + \alpha T^4$$

Sapendo che il calore specifico a volume costante (*ossia la capacità termica per unità di massa*), a 1 K e 2 K, vale rispettivamente

$$c_v(1\text{ K}) = 1{,}2\times10^{-2}\text{ J/kg K}$$
$$c_v(2\text{ K}) = 2{,}8\times10^{-2}\text{ J/kg K}$$

si trovino le costanti α e γ e si spieghi l'origine dei due contributi a *u(T)*.

c) Si trovino la temperatura di Debye T_D del Cu e il valore del c_v sopra definito per $T > 1000$ K. Si ricorda che

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

dove v_s è la velocità del suono per grandi lunghezze d'onda e N/V il numero di atomi per m^3. Si assuma che ognuna delle 3 branche acustiche abbia la forma

$$\omega(k) = \sqrt{\frac{4C}{M}}\sin(\frac{1}{2}ka)$$

dove C =5,58 N/m . Inoltre $\hbar = 1{,}05\times10^{-34}$ J$\cdot$s e $k_B = 1{,}38\times10^{-23}$ J/K .

__Soluzione__

a) Poiché Cu è monovalente,

$$n_{at} = n_{el} = 8{,}47\times10^{28}\text{ / m}^3 = 4/V = 4/a^3$$

dove 4 è il numero di atomi per cella fcc. Di qui,

$$a = \sqrt[3]{\frac{4}{n_{at}}} = \sqrt[3]{47{,}2\times10^{-30}} = 3{,}61\times10^{-10}\text{ m}$$

Inoltre

$$M = \frac{d}{n_{at}} = \frac{8920}{8{,}47\times10^{28}} = 1{,}06\times10^{-25}\text{ kg}$$

b) Il contributo in T^2 a *u(T)* corrisponde all'energia cinetica degli elettroni di conduzione, e quello in T^4 all'energia vibrazionale degli ioni.
Derivando si ottiene

$$c_v(T) = \left.\frac{du}{dT}\right|_v = 2\gamma T + 4\alpha T^3$$

Quindi

$$c_v(1\ \mathrm{K}) = 2\gamma + 4\alpha = 1{,}2\times 10^{-2}\ \mathrm{J/kg\ K}$$
$$c_v(2\ \mathrm{K}) = 4\gamma + 32\alpha = 2{,}8\times 10^{-2}\ \mathrm{J/kg\ K}$$

Risolvendo il sistema si trova

$$\alpha = 1{,}7\times 10^{-4}\ \mathrm{J/kgK^4};\ \ \gamma = 5{,}7\times 10^{-3}\ \mathrm{J/kgK^2}$$

c) Le uniche incognite nella temperatura di Debye sono la massa M, già trovata al punto a), e la velocità del suono, che nel modello di Debye è costante e uguale al suo limite per grandi lunghezze d'onda. Perciò v_s si ottiene derivando la relazione di dispersione della banda acustica e facendo tendere k a 0:

$$v_s = \left.\frac{d\omega}{dk}\right|_{k\to 0} = \left.\sqrt{\frac{C}{M}}a\cos\left(\frac{1}{2}ka\right)\right|_{k\to 0} = \sqrt{\frac{C}{M}}a = \sqrt{\frac{5{,}58}{1{,}06\times 10^{-25}}}3{,}61\times 10^{-10} = 2620\ \mathrm{m/s}$$

Quindi,

$$T_D = \frac{\hbar}{k_B}v_s\left(6\pi^2 n_{at}\right)^{\frac{1}{3}} = \frac{1{,}05\times 10^{-34}}{1{,}38\times 10^{-23}}\cdot 2620\cdot\sqrt[3]{6\pi^2\cdot 8{,}47\times 10^{28}} = 341\ \mathrm{K}$$

A T>1000 K $T >> T_D$. Quindi vale il limite classico e, con un solo atomo per cella, si hanno solo le 3 branche acustiche. Perciò,

$$c_v = 3\frac{N}{M}k_B = 3\frac{N/V}{M/V}k_B = 3\frac{n_{at}}{d}k_B = 3\frac{8{,}47\times 10^{28}}{8920}1{,}38\times 10^{-23} = 393\ \mathrm{J/kg\ K}$$

Esercizio 2
Si abbia un semiconduttore drogato con N_d=10^{21} m^{-3} impurezze donatrici.
Si sappia che alle tre temperature T_1= 750 K, T_2 = 450 K, e T_3= 120 K, le prime due nella regione intrinseca del semiconduttore (cioè la regione in cui dominano i portatori intrinseci), T_3 nella regione estrinseca, le corrispondenti conducibilità del semiconduttore siano σ_1=12.69 $(\Omega m)^{-1}$, σ_2=2.60 $(\Omega m)^{-1}$, e σ_3=0.0041 $(\Omega m)^{-1}$. Si ricorda che

$$n_i(T) = \sqrt{N_C(T)N_V(T)}e^{-E_g/2k_BT} = 2\left(\frac{k_BT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}\left(m_n m_p\right)^{3/4}e^{-E_g/2k_BT} \qquad (1)$$

a) Sapendo che nella regione intrinseca i tempi di scattering degli elettroni e delle lacune sono ben rappresentati dalle espressioni $\tau_n = \tau_{0,n}\,(T/300)^{-1.5}$ e $\tau_p = \tau_{0,p}\,(T/300)^{-1.5}$, determinare il valore della energia di gap (supposta essere indipendente dalla temperatura).
b) Sapendo che nella regione estrinseca si ha $\tau_n = \tau_{ext} = 5\mathrm{x}10^{-17}$ s, praticamente indipendente dalla temperatura, determinare la massa efficace degli elettroni.

c) Sapendo che la massa efficace delle lacune è il doppio di quella degli elettroni, determinare la temperatura T_1 alla quale la densità n_i degli elettroni di origine intrinseca è uguale a quella fornita dai donatori. In prima approssimazione, si assuma, **solo** nel termine $\left(\frac{k_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}$ della (1), T = costante = 120 K.

d) **Facoltativo,** per chi avesse ancora tempo.
Come si puo' migliorare la stima di T_1 ottenuta al punto precedente e portarla entro l'1% al valore vero?

Soluzione
a) Nella regione intrinseca valgono le relazioni

$$n = p$$

$$np = n_i^2 = N_v N_c e^{-E_g/k_BT} = 4\left(m_n m_p\right)^{3/2}\left(\frac{k_BT}{2\pi\hbar^2}\right)^3 e^{-E_g/k_BT}$$

$$\sigma = \frac{e^2 n\tau_n}{m_n} + \frac{e^2 p\tau_p}{m_p} = \left[\frac{e^2\tau_{0,n}}{m_n} + \frac{e^2\tau_{0,p}}{m_p}\right] n_i(T)\left(\frac{T}{300}\right)^{-3/2} = C\times(T)^{3/2} e^{-E_g/2k_BT}\left(\frac{T}{300}\right)^{-3/2}$$

$$= C' e^{-E_g/2k_BT}$$

per cui

$$\frac{\sigma(T=750K)}{\sigma(T=450K)} = \frac{12{,}69}{2{,}60} = \frac{e^{-E_g/2k_B 750}}{e^{-E_g/2k_B 450}} = e^{-\frac{E_g}{2k_B}\left(\frac{1}{750}-\frac{1}{450}\right)} = e^{\frac{E_g}{2k_B}\left(\frac{300}{750\times450}\right)} = e^{\frac{E_g}{2k_B}\left(\frac{2}{750\times3}\right)}$$

$$\ln\left[\frac{12{,}69}{2{,}6}\right]\times\frac{750\times3}{2} = \frac{E_g}{2k_B}$$

$$\frac{E_g}{k_B} = 2\times\ln(4{,}88)\times1125 = 2\times1{,}585\times1125 = 3570K = 0{,}307\,eV$$

b)
Nella regione estrinseca gli elettroni sono maggioritari (di densita' costante 10^{21} m^{-3}), per cui la conducibilità è determinata dai soli elettroni. Si ha pertanto

$$\sigma(T) = \frac{e^2 n\tau_n}{m_n} = \frac{e^2 n\tau_{0,n}}{m_n}\left(\frac{T}{300}\right)^{-3/2}$$

$$\sigma(120K) = 0{,}0041 = \frac{(1{,}6\cdot10^{-19})^2\times10^{21}\times5\cdot10^{-17}}{m_n}$$

$$m_n = \frac{(1{,}6\cdot10^{-19})^2\times10^{21}\times5\cdot10^{-17}}{0{,}0041} = \frac{12{,}8\times10^{-34}}{0{,}0041} = 3{,}122\times10^{-31}\,Kg = 0{,}343\,m_0$$

c)
Poiché a T_1 tutti i donatori saranno certamente ionizzati, si deve imporre

$$n_i(T_1) = N_C(T_1)\, e^{-(E_C-\mu)/kT_1} = N_d$$

$$2\left(\frac{k_B \cdot T_1}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \left(m_n m_p\right)^{3/4} e^{-E_g/2k_BT_1} = 10^{21}$$

$$2\left(\frac{1,38\cdot 10^{-23}\times 120}{2\pi(1,05\cdot 10^{-34})^2}\right)^{3/2} \times\left[2\times(3,122\cdot 10^{-31})^2\right]^{3/4} e^{-E_g/2k_BT_1} = 10^{21}$$

$$7,39\cdot 10^{69}\times 2,93\cdot 10^{-46} e^{-E_g/2k_BT_1} = 10^{21}$$

$$e^{-E_g/2k_BT_1} = 4,62\cdot 10^{-4} \qquad \frac{E_g}{2k_BT_1} = -\ln(4,62\cdot 10^{-4}) = 7,68 \qquad T_1 = 3570/15,4 = 232K$$

d)
Procediamo ora in modo iterativo. Sostituiamo la nuova determinazione della T_1 appena ottenuta nella densita' degli stati per ottenere una stima meglio approssimata della T_1 stessa

$$2\left(\frac{1,38\cdot 10^{-23}\times 232}{2\pi\,(1,05\cdot 10^{-34})^2}\right)^{3/2} \times\left[2\times(3,122\cdot 10^{-31})^2\right]^{3/4} e^{-E_g/2k_BT_1} = 10^{21}$$

$$7,39\cdot 10^{69}\times\left(\frac{232}{120}\right)^{3/2} \times 2,93\cdot 10^{-46} e^{-E_g/2k_BT_1} = 10^{21}$$

$$e^{-E_g/2k_BT_1} = 1,72\cdot 10^{-4} \qquad \frac{E_g}{2k_BT_1} = -\ln(1,72\cdot 10^{-4}) = 8,67 \qquad T_1 = 3566/17,34 = 206\,K$$

valore che differisce dell' 11% [(232-206)/232] dal precedente. Con una ulteriore passo otteniamo una stima ancora migliore

$$7,39\cdot 10^{69}\times\left(\frac{206}{120}\right)^{3/2} \times 2,93\cdot 10^{-46} e^{-E_g/2k_BT_1} = 10^{21}$$

$$e^{-E_g/2k_BT_1} = 2,05\cdot 10^{-4} \qquad \frac{E_g}{2k_BT_1} = -\ln(2,05\cdot 10^{-4}) = 8,49 \qquad T_1 = 3570/17,0 = 210K$$

con una differenza del 2% rispetto al valore precedente. Con un altro passo si arriva alla convergenza voluta

$$7,39\cdot 10^{69}\times\left(\frac{210}{120}\right)^{3/2} \times 2,93\cdot 10^{-46} e^{-E_g/2k_BT_1} = 10^{21}$$

$$e^{-E_g/2k_BT_1} = 1,99\cdot 10^{-4} \qquad \frac{E_g}{2k_BT_1} = -\ln(2,05\cdot 10^{-4}) = 8,52 \qquad T_1 = 3566/17,04 = 209\,K$$