

I Esonero di Materia Condensata - 2 Dicembre 2014

Proff. Paolo Calvani e Mario Capizzi

Esercizio 1

Un ipotetico cristallo bidimensionale quadrato, con reticolo anche esso quadrato nel piano x - y e di passo a , ospita N^2 atomi monovalenti con orbitale di valenza di tipo p_x .

Utilizzando l'espressione approssimata del legame forte limitata ai primi vicini

$$v(\vec{k}) = v_{p_x} - \epsilon - \sum_{\vec{R} \neq 0} \chi(\vec{R}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}}$$

si risponda alle seguenti domande:

- assumendo $v_{p_x} - \epsilon = 0$, scrivere l'espressione esplicita dell'energia $v(k_x, k_y)$ sapendo che vi compaiono due integrali di trasferimento di moduli $|\chi_1| = 0,8 \text{ eV}$ e $|\chi_2| = 0,5 \text{ eV}$;
- determinare $v(k_x, k_y)$ nei punti $(0,0), (0,1), (1,0)$ e $(1,1)$ della ZB (in unità $\pm f/a$) e trovare la larghezza della banda Δv in eV;
- determinare le componenti m_{xx} e m_{yy} del tensore massa efficace e dire, per ognuna di esse, in quali zone della ZB è finita e positiva;
- Considerando infine gli elettroni p_x del sistema come se fossero totalmente liberi, confrontare il cerchio di Fermi con la prima ZB e dire se a $T=0$ gli stati sul perimetro della ZB sono vuoti, occupati, o parzialmente occupati.

Esercizio 2

Un ipotetico metallo monovalente di densità atomica $\rho = 6,0 \times 10^{22} \text{ atomi/cm}^3$ cristallizza in un reticolo cubico ove ogni atomo ha 8 primi vicini.

- Nota la velocità di deriva a $T=25 \text{ }^\circ\text{C}$ (pari a $12,7 \text{ cm/s}$ per un campo $E_0 = 1.0 \text{ V/cm}$), si determini la massa efficace al livello di Fermi sapendo che gli elettroni subiscono in media $1,38 \times 10^{14}$ urti al secondo.
- Si determini poi la velocità di deriva di un elettrone al minimo della banda, sottoposto a un campo $2 E_0$, sapendo che la curva di dispersione della energia è data da $E(k) = A - \cos(ka) \text{ eV}$, assumendo che il tempo medio fra due urti non dipenda dalla energia.
- Si determini la nuova energia di Fermi, rispetto al fondo della banda di conduzione, nel caso in cui la curva di dispersione dell'energia sia data da $E(k) = A - 2\cos(ka) \text{ eV}$ invece che da $E(k) = A - \cos(ka)$. Si assuma di essere in un caso unidimensionale per atomi sempre monovalenti.

$$\hbar = 1,05 \times 10^{-34} \text{ Js}; \quad e = 1,6 \times 10^{-19} \text{ C}$$

Soluzioni

Esercizio 1

a) Poiché

$$\chi(\bar{R}) = - \int \mathbb{E}_{p_x}^*(\bar{r}) \Delta V(\bar{r}) \mathbb{E}_{p_x}(\bar{r} - \bar{R}) d\bar{r}$$

e la funzione p_x ha due lobi lungo la direzione x , uno positivo e uno negativo, γ_x è negativo e γ_y positivo. Inoltre, data la forma delle funzioni p_x , allungate lungo la direzione x , si ha $|\gamma_y| < |\gamma_x|$. Pertanto $\gamma_x = \gamma_1 = -0,8$ eV e $\gamma_y = \gamma_2 = +0,5$ eV.

$$v(\bar{k}) = -2\chi_x \cos k_x a - 2\chi_y \cos k_y a = 1,6 \cos k_x a - \cos k_y a \text{ (eV)}$$

b) Nei punti citati della ZB, in unità $\pm f/a$, si ha

$$v(0,0) = 0,6 \text{ eV}; v(1,0) = -2,6 \text{ eV};$$

$$v(0,1) = 2,6 \text{ eV}; v(1,1) = -0,6 \text{ eV};$$

e la larghezza di banda è 5,2 eV.

c) Si ha

$$m_{xx}^* = \hbar^2 \left[\frac{\partial^2 v(\bar{k})}{\partial k_x^2} \right]^{-1} = \frac{\hbar^2}{-1,6 a^2 \cos k_x a}$$

$$m_{yy}^* = \hbar^2 \left[\frac{\partial^2 v(\bar{k})}{\partial k_y^2} \right]^{-1} = \frac{\hbar^2}{a^2 \cos k_y a}$$

Di qui si vede che

$$m_{xx}^* \text{ è positiva e finita per } f/2a < k_x \leq f/a \text{ e } -f/a \leq k_x < -f/2a$$

$$m_{yy}^* \text{ è positiva e finita per } 0 \leq k_y < f/2a \text{ e } -f/2a < k_y < 0$$

d) Se L è il lato del campione, la densità degli stati è

$$\left(\frac{L}{2f} \right)^2 = \frac{N^2 a^2}{(2f)^2}$$

Tenendo conto della degenerazione di spin, e poiché il numero degli stati è uguale al numero degli elettroni liberi, si ha

$$2f k_F^2 \frac{N^2 a^2}{(2f)^2} = N^2$$

Quindi

$$k_F = \frac{\sqrt{2f}}{a} < \frac{f}{a}$$

Quindi il cerchio di Fermi è tutto interno alla prima zona di Brillouin e gli stati sul perimetro della ZB sono tutti vuoti a T=0.

Esercizio 2

1) La velocità di deriva di un elettrone di conduzione è data da $v_d = \mu E$ con $\mu = e\tau/m^*$ ove m^* è la sua massa efficace all'energia di Fermi. Il tempo medio fra due urti è dato dall'inverso del numero medio di urti al secondo.

Pertanto, nel sistema SI

$$m^* = e\tau/\mu = e\tau E/v_d = (1,6 \times 10^{-19} \times 10^2)/(1,38 \times 10^{14} \times 0,127) = 9,1 \times 10^{-31} \text{ kg} \\ = 1,0 m_0$$

2) Per determinare la velocità di deriva al minimo di banda si deve conoscere la massa a tale minimo, che, data la curva di dispersione della energia, si trova a $k=0$. Pertanto

$$m_{k=0}^* = \hbar^2/a^2$$

Si deve perciò determinare il parametro reticolare. L'unico cristallo cubico con 8 primi vicini per atomo è il bcc, per cui

$$\rho = 2/a^3 = 6,0 \times 10^{22} \text{ atomi/cm}^3 \text{ e}$$

$$a = \sqrt[3]{2/6,0 \times 10^{22}} = 3,2 \times 10^{-8} \text{ cm} = 3,2 \times 10^{-10} \text{ m}$$

$$m_{k=0}^* = \hbar^2/a^2 = (1,05 \times 10^{-34})^2/1,6 \times 10^{-19} \times (3,2 \times 10^{-10})^2 = 6,7 \times 10^{-31} = 0,74 m_0$$

$$v_d = \mu E = 0,127 \times 2/0,74 = 0,34 \text{ m/s}$$

3) La larghezza della banda raddoppia, ma il suo baricentro resta lo stesso e l'energia di Fermi si colloca a metà banda. Se valutata rispetto al fondo della banda di conduzione, l'energia di Fermi si colloca a 2 eV e cresce di $(4-2)/2 = 1$ eV rispetto al caso precedente.