

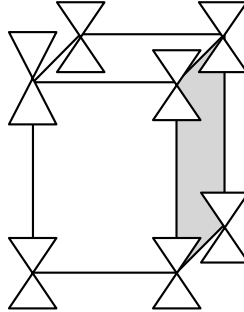
Prima prova di esonero di Materia Condensata

22 novembre 2011

Proff. Paolo Calvani e Mario Capizzi

1° Esercizio

Un solido monoatomico e monovalente cristallizza in un reticolo cubico semplice con lato del cubo $a = 2,0 \text{ \AA}$. L'elettrone di valenza è di tipo p_z .



a) Scrivere la forma esplicita della banda risultante nell'approssimazione a "tight binding" a primi vicini

$$\varepsilon(\vec{k}) = E'_0 - \sum_{\vec{R} \neq 0} \gamma(\vec{R}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}}$$

dove $\gamma(\vec{R}) = -\int \psi_p^*(\vec{r}) \Delta V(\vec{r}) \psi_p(\vec{r} - \vec{R}) d\vec{r}$ e ΔV è la correzione dovuta al potenziale cristallino.

Si assuma $|\gamma| = 0,8 \text{ eV}$ nelle tre direzioni x, y, z , e $E'_0 = 3,2 \text{ eV}$

b) Scrivere e graficare l'espressione della banda nelle tre direzioni dello spazio \vec{k} $(1,0,0)$, $(0,1,0)$ e $(0,0,1)$ — limitatamente alla prima zona di Brillouin — indicando per quali valori di \vec{k} $\varepsilon(\vec{k})$ è minima, per quali è massima e fornire i relativi valori dell'energia;

c) trovare le masse efficaci m_{xx}, m_{yy}, m_{zz} a $\vec{k} = 0$.

$\hbar = 1,05 \times 10^{-27} \text{ erg}\cdot\text{s}$; $1 \text{ eV} = 1,6 \times 10^{-12} \text{ erg}$

2° Esercizio

Si consideri una catena lineare di N atomi trivalenti. Le due bande di energia più alta siano descritte da

$$E_1(k) = -A[1 + \cos(ka)]$$

$$E_2(k) = B[2 + \cos(ka)]$$

Si chiede, a $T = 0$:

- l'energia minima e quella massima per transizioni fra queste due bande a $T=0$ in cui si conservi il vettore d'onda degli elettroni k ;
- la velocità massima di un elettrone, in modulo e in ms^{-1} , nell'insieme di queste due bande;
- la massima energia che può avere un elettrone nell'insieme di queste due bande;
- la velocità di drift (o di deriva) dell'insieme degli elettroni che partecipano alla conduzione se il campo elettrico applicato è $E = 0,1 \text{ Vm}^{-1}$ e la conducibilità della catena è $\sigma = 0,1 \text{ } \Omega^{-1}\text{m}$.

$$A = 1,0 \text{ eV}; \quad B = 2,0 \text{ eV}; \quad a = 2,1 \text{ \AA}; \quad \sigma = \frac{ne^2\tau}{m^*}$$

Soluzione 1° Esercizio

a) La funzione p_z ha due lobi lungo la direzione z , uno positivo e uno negativo. Pertanto si hanno due diversi valori di γ a seconda che si considerino valori di \mathbf{R} nei piani xy , oppure lungo z . Poiché il modulo è lo stesso, $\gamma_x = \gamma_y = +0,8 \text{ eV}$ e $\gamma_z = -0,8 \text{ eV}$ (si ricorda che la correzione ΔV dovuta al potenziale cristallino è negativa). Posto $\gamma = 0,8 \text{ eV}$, si ha

$$\begin{aligned}\varepsilon(\bar{k}) &= E_0 - 2\gamma \cos k_x a - 2\gamma \cos k_y a - 2\gamma \cos k_z a = \\ &= 3,2 - 1,6(\cos k_x a + \cos k_y a) + 1,6 \cos k_z a\end{aligned}$$

b) Nelle tre direzioni pertanto si ha:

$$\begin{aligned}\varepsilon(k_x, 0, 0) &= 3,2 - 1,6 \cos k_x a \\ \varepsilon(0, k_y, 0) &= 3,2 - 1,6 \cos k_y a \\ \varepsilon(0, 0, k_z) &= 1,6 \cos k_z a\end{aligned}$$

Le formule e il grafico evidenziano che

$$\begin{aligned}\varepsilon(0, 0, 0) &= 1,6 \text{ eV}; \\ \varepsilon\left(\pm \frac{\pi}{a}, 0, 0\right) &= \varepsilon\left(0, \pm \frac{\pi}{a}, 0\right) = 4,8 \text{ eV}, \quad \varepsilon\left(0, 0, \pm \frac{\pi}{a}\right) = -1,6 \text{ eV}\end{aligned}$$

Il primo valore è il massimo assoluto, il secondo il minimo assoluto della banda lungo le tre direzioni indicate. Il massimo assoluto nell'intera zona cubica di Brillouin si ha comunque nelle posizioni

$$\left(\pm \frac{\pi}{a}, \pm \frac{\pi}{a}, 0\right) \text{ e vale } 8 \text{ eV}.$$

c)

$$\left. \frac{\partial^2 E(k)}{\partial k_x^2} \right|_0 = \left. \frac{\partial^2 E(k)}{\partial k_y^2} \right|_0 = 1,6a^2 \cos ka \Big|_0 = 1,6a^2$$

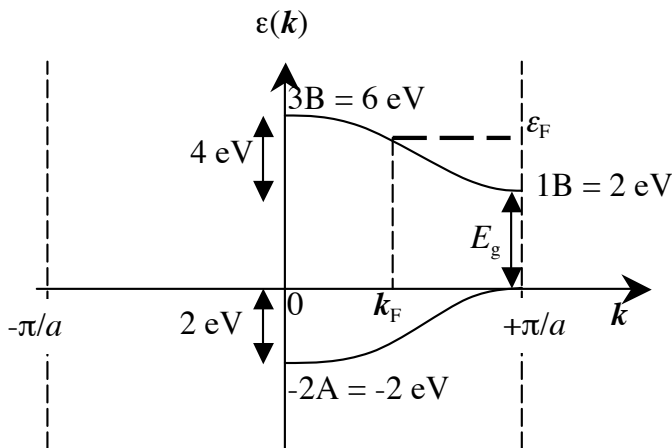
$$\left. \frac{\partial^2 E(k)}{\partial k_z^2} \right|_0 = -1,6a^2 \cos ka \Big|_0 = -1,6a^2$$

$$m_{xx}^*(0) = m_{yy}^*(0) = \left(\frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(k)}{\partial k_x^2} \right)_{k_x=0}^{-1} = \frac{\hbar^2}{1,6a^2} = \frac{(1,05 \times 10^{-27})^2}{1,6 \times 1,6 \times 10^{-12} (2 \times 10^{-8})^2} = 1,1 \times 10^{-27} \text{ g}$$

$$m_{zz}^*(0) = \left(\frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(k)}{\partial k_y^2} \right)_{k_y=0}^{-1} = -1,1 \times 10^{-27} \text{ g}$$

Soluzione 2° Esercizio

a)



Essendo il materiale trivalente, i primi $2N$ elettroni di valenza si situeranno sulla banda inferiore e gli ultimi N elettroni occuperanno metà della seconda banda, sino a $k=k_F=\pi/(2a)$, a formare un metallo. L'energia minima di cui alla domanda corrisponde a una transizione a $k=\pm k_F=\pm\pi/(2a)$, di energia $E_{\min}=4-(-1)=5$ eV, mentre la transizione a energia massima si ha per $k=0$, ed e' pari a $E_{\max}=6-(-2)=8$ eV.

b)

$$v(k) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E(k)}{\partial k}$$

La velocità massima, in modulo, si ha a $k=\pm k_F=\pi/(2a)$, e si ha nella seconda banda ($A < B$) per cui

$$|v_{\max}(k)| = |v(k_F)| = \left| \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E(k)}{\partial k} \right|_{k=k_F} = \frac{1}{\hbar} Ba \cdot \text{sen}(\pi/2) = \frac{2 \cdot 1.6 \cdot 10^{-19} \cdot 2.1 \cdot 10^{-10}}{1.05 \cdot 10^{-34}} m \cdot s^{-1} = 6.4 \cdot 10^5 m \cdot s^{-1}$$

c)

L'energia massima degli elettroni a $T=0$ è quella all'energia di Fermi, per cui

$$E_{\max}(k) = E(k_F) = B[2 + \cos(\pi/2)] = 4 eV$$

d) La densità di elettroni liberi è data da $n = 1/a$, in quanto un solo elettrone per atomo può partecipare alla conduzione, per cui

$$j = nev_d$$

$$j = \sigma \cdot E$$

$$v_d = \frac{\sigma}{ne} E = \frac{\sigma a}{e} E = \frac{0.1 \cdot 2.1 \cdot 10^{-10} \cdot 10^{-1}}{1.6 \cdot 10^{-19}} = 1.3 \cdot 10^7 ms^{-1}$$