<u>**FISICA DELLA MATERIA CONDENSATA**</u>

Proff. P. Calvani e M. Capizzi

II prova di esonero - 24 gennaio 2012

Esercizio 1.

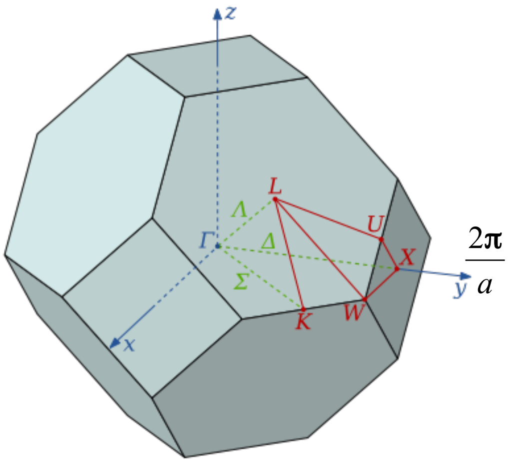
Un cristallo di Pb, la cui densità è $\rho = 11340$ kg/m^3, ha una struttura cubica a facce centrate con base monoatomica. La banda acustica, che si assume triplamente degenere, è descritta da

$$\omega(k) = 2\sqrt{\frac{C}{M_a}}\sin\left(\frac{ka}{2}\right),$$

dove $C = 1{,}14$ N/m e M_a = 207 u. m. a. è la massa atomica del Pb.

1) Calcolare la velocità del suono v_S.

2a) Calcolare il valore del vettore d'onda di Debye $k_D = \left(6\pi^2 n\right)^{\frac{1}{3}}$ (dove n è il numero di atomi per m^3) e commentarne il valore in relazione alle dimensioni della prima zona di Brillouin (vedi Figura). Determinare il valore di tale vettore d'onda nel caso di base biatomica con parametro reticolare immutato.



2b) Calcolare la temperatura di Debye T_D del Pb.

3) Calcolare la capacità termica per unità di massa del piombo a 1 K, assumendo che a 0,2 K i contributi alla capacità termica del reticolo e degli elettroni siano uguali: $C_r = C_{el}$ Si ricorda che la formula del contributo reticolare per unità di volume è

$$c_v = \frac{12\pi^4}{5}\left(\frac{T}{T_D}\right)^3 nk_B$$

k_B= 1.38×10^{-23} J·K^{-1}; ħ= 1.05×10^{-34} J·s; u.m.a. = 1.67×10^{-27} kg

Esercizio 2.

1) Nell'InAs intrinseco la concentrazione dei portatori liberi a due temperature è data da

$$n_i(200)=7.6\times10^{12}\ \mathrm{cm}^{-3};\qquad n_i(300)=8.7\times10^{14}\ \mathrm{cm}^{-3}$$

mentre la gap interbanda varia con la temperatura secondo la legge

$$E_g(T) = E_0 - \frac{AT^2}{T+83}.$$

Si determini il valore della gap (in K) a 400 K, sapendo che nella formula che fornisce la dipendenza esponenziale di n_i dalla temperatura si ha

$$N_c(T) = 1.68\times10^{13}\ T^{3/2}\ \mathrm{cm}^{-3};\quad N_v(T) = 1.27\times10^{15}\ T^{3/2}\ \mathrm{cm}^{-3}$$

2) La mobilità totale μ_t delle lacune è legata al contributo μ_{imp} della diffusione dalle impurezze e a quello μ_{ret} della diffusione dai fononi dalla legge (della composizione delle probabilità di eventi indipendenti)

$$1/\mu_t = 1/\mu_{imp} + 1/\mu_{ret}.$$

Queste a loro volta variano con la temperatura come

$$\mu_{imp}=AT^{3/2}\ \mathrm{m}^2\cdot\mathrm{V}^{-}1\cdot\mathrm{s}^{-1};\qquad \mu_{ret}= BT^{-3/2}\ \mathrm{m}^2\cdot\mathrm{V}^{-1}\cdot\mathrm{s}^{-1}$$

dove $A = 1{,}0\times10^{-4}$ e $B = 1{,}0\times10^{2}$ nelle unità del SI. Determinare:

a) la temperatura T_M alla quale la mobilità totale μ_t assume il suo valore massimo;

b) il valore di $\mu_t(T=T_M)$.

3) (Solo per gli studenti del Prof. Capizzi)

In un semiconduttore drogato, la temperatura T_M varia con il drogaggio. A tre diverse concentrazioni di accettori si trova

$$T_{M1} = 70\ \mathrm{K}\ \text{per}\ N_{A1}=5.7\times10^{22}\ \mathrm{m}^{-3}$$
$$T_{M2} = 100\ \mathrm{K}\ \text{per}\ N_{A2}=1.6\times10^{23}\ \mathrm{m}^{-3}$$
$$T_{M3} = 200\ \mathrm{K}\ \text{per}\ N_{A3}=1.63\times10^{24}\ \mathrm{m}^{-3}$$

Basandosi su questi dati, determinare la dipendenza di μ_{imp} dalla concentrazione di impurezze N_A e (facoltativo) commentarla.

Soluzioni

Esercizio 1

1) $M_a = 207 \cdot 1{,}67\times10^{-27} = 3{,}46\times10^{-25}$ kg

$$a = \sqrt[3]{\frac{4M_a}{\rho}} = \sqrt[3]{\frac{13{,}8\times10^{-25}}{11340}} = \sqrt[3]{0{,}122\times10^{-27}} = 0{,}496\times10^{-9}\ \text{m}$$

$$v_s = \frac{d\omega}{dk} = a\sqrt{\frac{C}{M_a}} = 0{,}496\times10^{-9}\sqrt{\frac{1{,}14}{0{,}346\times10^{-24}}} = 900\ \text{m/s}$$

2) $k_D = \left(6\pi^2 n\right)^{\frac{1}{3}} = \frac{\pi}{a}\left(24/\pi\right)^{\frac{1}{3}} = 1{,}97\frac{\pi}{a} \cong \frac{2\pi}{a}$

k_D è praticamente uguale al vettore di bordo zona nella direzione [100] ed equivalenti. Tale risultato era prevedibile in quanto la ZB dell'fcc è circa isotropa (vedi figura), di forma simile a una sfera, e con soli modi acustici, essendo la base monoatomica. Pertanto, la sfera di Debye, costruita a partire da soli modi acustici, deve avere contenere tutti gli stati possibili nella ZB e quindi avere raggio k_D pressoché equivalente a quello di bordo zona.

Nel caso di base biatomica, la formula prevede che a parametro reticolare invariato tale raggio dovra' aumentare di un fattore $2^{1/3}$ in modo da raddoppiare il volume della sfera di Debye e tenere conto del raddoppio dei modi di vibrazione (3 acustici e 3 ottici) del cristallo.

$$T_D = \frac{\hbar\omega_D}{k_B} = \frac{\hbar v_s k_D}{k_B} = \frac{1{,}05\times10^{-34}\times900\times1{,}97\pi}{0{,}496\times10^{-9}\times1{,}38\times10^{-23}} = 85{,}4\ \text{K}$$

3) A 0.2 K il contributo reticolare è

$$\frac{C_r}{M} = \frac{1}{\rho}\frac{12\pi^4}{5}\left(\frac{T}{T_D}\right)^3 nk_B = \frac{1}{11340}\frac{12\pi^4}{5}\left(\frac{0{,}2}{85{,}4}\right)^3\frac{4}{(0{,}496\times10^{-9})^3}1{,}38\times10^{-23} = 1{,}20\times10^{-4}\ \text{J/kgK} = \frac{C_e}{M}$$

A 1 K, $\frac{C_e}{M}$ è cresciuto di 5 volte, mentre $\frac{C_r}{M}$ è cresciuto di 125 volte. Quindi

$$\frac{C_{tot}(1K)}{M} = 130\frac{C_r(0{,}2K)}{M} = 1{,}56\times10^{-2}\ \text{J/kgK}$$

Esercizio 2

1) $n_i(T) = \sqrt{N_C(T)N_V(T)}\,e^{-E_g(T)/(2kT)} = 1.46\times10^{14}\times T^{3/2}e^{-E_g(T)/(2k_BT)}$

$$\frac{E_g(300)}{k_B} = 600\ln\frac{1.46\times10^{14}\times300^{3/2}}{8.7\times10^{14}} = 600\times6.77 = 4062K$$

$$\frac{E_g(200)}{k_B} = 400\ln\frac{1.46\times10^{14}\times200^{3/2}}{7.6\times10^{12}} = 400\times10.9 = 4361K$$

$$4062 = E_0 - A\frac{300^2}{383} \qquad 4361 = E_0 - A\frac{200^2}{283}$$

$$4361-4062 = A\left(\frac{300^2}{383}-\frac{200^2}{283}\right) = 93.6A$$

$$A = 3.19 \qquad E_0 = 4062 + A\frac{300^2}{383} = 4812K$$

$$\frac{E_g(400)}{k_B} = 3754K = 0.323eV$$

2) $$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{AT^{3/2}} + \frac{1}{BT^{-3/2}} = \frac{T^{-3/2}}{A} + \frac{T^{3/2}}{B}$$

I massimi e minimi di una funzione si sovrappongono ai massimi e minimi della sua funzione inversa, per cui

a)

$$\frac{\partial}{\partial T}\left(\frac{1}{\mu}\right) = -\frac{3}{2}\frac{T^{-5/2}}{A} + \frac{3}{2}\frac{T^{1/2}}{B} = 0$$

$$\Rightarrow -\frac{T_M^{-3}}{A} + \frac{1}{B} = 0 \Rightarrow$$

$$T_M = \left(\frac{A}{B}\right)^{-1/3} = 100K$$

b)

$$\frac{1}{\mu(T_M)} = \frac{10^{-3}}{1{,}0\times10^{-4}} + \frac{10^3}{1{,}0\times10^2} = 20$$

$$\mu = 0.05\ \mathrm{m^2V^{-1}s^{-1}}$$

3)

La diffusione da reticolo non dipende dalla concentrazione di impurezze, per cui si ha B=cost e

$A = K_2 N_A^{\alpha}$, si ottiene

$$T_M = K_1 A^{-1/3} = K_1\left(K_2 N_A^{\alpha}\right)^{-1/3} = K_3 N_A^{-\alpha/3}$$

$$\boldsymbol{ln}\,T_M = -\frac{\alpha}{3}\boldsymbol{ln}\,N_A + \boldsymbol{cos}\,t$$

$$4.248 = -\frac{\alpha}{3}1.74 + \boldsymbol{cos}\,t$$

$$4.60 = -\frac{\alpha}{3}2.77 + \boldsymbol{cos}\,t$$

$$5.30 = -\frac{\alpha}{3}5.09 + \boldsymbol{cos}\,t$$

$$0.352 = -\frac{\alpha}{3}1.03 \Rightarrow \alpha = -1.02$$

$$1.052 = -\frac{\alpha}{3}3.35 \Rightarrow \alpha = -0.94$$

Pertanto $\alpha \sim -1$ e la mobilita' dovuta alle impurezze dipende dall'inverso della loro concentrazione. In un modello semplice di diffusione alla Rutherford, tale dipendenza dovrebbe essere dall'inverso della radice cubica della concentrazione, ossia dalla distanza media fra le impurezze. La discrepanza con il modello teorico suggerisce che altri meccanismi di diffusione, non considerati qui, intervengano a determinare la dipendenza dalla temperatura e concentrazione di impurezze della mobilita' delle lacune nell'InAs.