

Corso di Materia condensata

Prova scritta del 3-7-13

Proff. P. Calvani e M. Capizzi

Esercizio 1

In un ipotetico semiconduttore unidimensionale, il cui reticolo monoatomico ha passo $a = 0,3\text{nm}$, la curva di dispersione dell'energia della ultima banda non completamente piena è data da un modello a tight binding a primi vicini con integrale di sovrapposizione trascurabile.

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

Noti il tempo di scattering $\tau = 10^{-13}\text{s}$ (indipendente dalla energia) si determini:

- la massa efficace dei portatori che contribuiscono alla conduzione, sapendo che la velocità di deriva è $v_d = 10^{-2} v_F = 10^4 \text{ m s}^{-1}$ (dove v_F è la velocità di Fermi) per un campo applicato $E = 10^5 \text{ Vm}^{-1}$,
- di quanto deve variare il vettore d'onda di Fermi k_F , mantenendo inalterato il rapporto $v_d = 10^{-2} v_F$, perché la massa efficace dei portatori che effettivamente contribuiscono alla conduzione triplichi rispetto al valore trovato in a).

Si utilizzi il modello di Sommerfeld per la conduzione.

Esercizio 2

Un ipotetico semiconduttore, drogato n , ha una energia di attivazione dei donori $E_d/k_B = 30 \text{ K}$ e una gap $E_g \gg E_d$. A 1 K , il contributo al calore specifico degli elettroni liberi è

$$c_v^{el}(1\text{K}) = 3,3 \times 10^{-3} \text{ erg/cm}^3 \text{ K}.$$

Esplicitando ogni volta le approssimazioni utilizzate, e assumendo per semplicità che il potenziale chimico non dipenda dalla temperatura, si risponda ai seguenti quesiti:

- assumendo che a 5 K il contributo degli elettroni liberi sia divenuto pari a quello del reticolo alla stessa temperatura, determinare il valore c_v del calore specifico del semiconduttore a 5 K ;
- sapendo che la temperatura di Debye del semiconduttore è $T_D = 200 \text{ K}$, trovare il suo calore specifico a 40 K ;
- determinare il calore specifico del semiconduttore a 1000 K .
- Spiegare brevemente perché è stato necessario assumere che il potenziale chimico sia indipendente dalla temperatura.

Si ricordano le formule per la densità dei portatori nel semiconduttore drogato e per il contributo di Debye al calore specifico:

$$n = (N_c N_d)^{\frac{1}{2}} \exp(-E_d / 2k_B T); \quad c_v^{ret}(T) = N k_B \frac{12\pi^4}{5} \left(\frac{T}{T_D}\right)^3$$

dove N_c è la densità degli stati in banda di conduzione, N_d la concentrazione di donori e N il numero di atomi per unità di volume.

$$\hbar = 1,05 \times 10^{-27} \text{ erg s} = 1,05 \times 10^{-34} \text{ J s} \quad k_B = 1,38 \times 10^{-16} \text{ erg K}^{-1} = 1,38 \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1} \quad e = 1,6 \times 10^{-19} \text{ C}$$

Soluzioni

Esercizio 1

a)

$$v_d = \mu E = \frac{e\tau}{m^*} E$$

$$m^* = \frac{e\tau}{v_d} E = \frac{1,6 \times 10^{-19} \times 10^{-13}}{10^4} \times 10^5 = 1,6 \times 10^{-31} \text{ kg}$$

b)

Il valore iniziale di k_F si trova dalla relazione

$$v_d = 10^4 = 10^{-2} \frac{\hbar k_F}{m^*} m \text{ s}^{-1}$$

$$k_F = \frac{10^4 \times 1,6 \times 10^{-31}}{10^{-2} \times 1,05 \times 10^{-34}} = 1,52 \times 10^9 \text{ m}^{-1}$$

mentre la nuova massa efficace va cercata determinando la forma della banda con il metodo tight binding

$$m^*(k_F) = \hbar^2 \left(\frac{\partial^2 \varepsilon(k)}{\partial k^2} \right)^{-1} \Bigg|_{k=k_F} \Rightarrow 1,6 \times 10^{-31} = \hbar^2 \frac{1}{2\gamma a^2 \cos(k_F a)}$$

$$2\gamma = \frac{1}{m^*} \frac{\hbar^2}{a^2 \cos(k_F a)} = \frac{1,1 \times 10^{-68}}{1,6 \times 10^{-31} \times 9 \times 10^{-20} \times 0,898} = 8,5 \times 10^{-19} \text{ J} = 5,3 \text{ eV}$$

$$m^*(xk_F) = 4,8 \times 10^{-31} = \hbar^2 \frac{1}{2\gamma a^2 \cos(xk_F a)}$$

$$\cos(xk_F a) = \frac{1,1 \times 10^{-68}}{8,5 \times 10^{-19} \times 9 \times 10^{-20} \times 4,8 \times 10^{-31}} = 0,3$$

$$xk_F a = 1,27$$

$$x = \frac{1,27}{3 \times 10^{-10} \times 1,52 \times 10^9} = 2,78$$

Esercizio 2

a) Si ha

$$c_v^{el}(T) = \frac{\pi^2}{2} \left(\frac{T}{T_F} \right) n k_B$$

dove T_F è la temperatura di Fermi (che è costante perché si assume costante μ) e n il numero dei portatori, che a sua volta varia con T secondo la formula

$$n = (N_c N_d)^{\frac{1}{2}} \exp(-E_d / 2k_B T)$$

dove $N_c \propto T^{\frac{3}{2}}$

Perciò

$$\frac{n(5K)}{n(1K)} = \left(\frac{5}{1} \right)^{\frac{3}{2}} \exp[-15(1/5 - 1)] = 3,34 \times 1,63 \times 10^5 = 5,45 \times 10^5$$

e, dato che $c_v(5K) = 2 \cdot c_v^{el}(5K)$,

$$c_v(5K) = 2 \cdot c_v^{el}(1K) \frac{n(5K)}{n(1K)} \frac{5}{1} = 2 \times 3,3 \times 10^{-3} \times 5,45 \times 10^5 \times 5 = 18,0 \times 10^3 \text{ erg/cm}^3\text{K}$$

b) A 40 K si può calcolare come sopra il contributo dei portatori :

$$n(40K) = n(5K) \cdot \left(\frac{40}{5} \right)^{\frac{3}{2}} \exp[-15(1/40 - 1/5)] = n(5K) \times 4,75 \times 13,8 = n(5K) \times 65,6$$

$$c_v^{el}(40K) = \frac{1}{2} \cdot c_v(5K) \times 65,6 \times \left(\frac{40}{5} \right) = 9,0 \times 10^3 \times 65,6 \times 8 = 4,71 \times 10^6 \text{ erg/cm}^3\text{K}$$

e applicare il modello di Debye per il reticolo

$$c_v^{ret}(40K) = \frac{1}{2} \cdot c_v(5K) \cdot \left(\frac{40}{5} \right)^3 = 9,0 \times 10^3 \times 512 = 4,62 \times 10^6 \text{ erg/cm}^3\text{K}$$

c) A 1000 K si può senz'altro trascurare il contributo degli elettroni liberi e usare l'approssimazione di Dulong-Petit. La densità di atomi si ricava dalla formula di Debye

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

applicata a 40 K:

$$N = \frac{c_v^{ret}(40K)}{k_B \frac{12\pi^4}{5} \left(\frac{40}{200}\right)^3} = \frac{4,62 \times 10^6}{1,38 \times 10^{-16} \times 233 \times 0,008} = 1,8 \times 10^{22} \text{ at/cm}^3$$

Infine

$$c_v(1000K) = 3Nk_B = 3 \times 1,8 \times 10^{22} \times 1,38 \times 10^{-16} = 7,5 \times 10^6 \text{ erg/cm}^3\text{K}$$

d) Il potenziale chimico, coincidente con l'energia di Fermi a T=0, dipende dalla concentrazione dei portatori, che solo in un metallo è indipendente dalla temperatura.