Corso di Materia condensata

Prova scritta del 4-7-12

Proff. P. Calvani e M. Capizzi

Esercizio 1

1) Si consideri un gas di elettroni liberi in un reticolo quadrato di lato *a*.
Quale deve essere il valore di *a* perché la massima differenza di energia ΔE^M che possono avere gli elettroni sul perimetro della prima zona di Brillouin, ZB, sia pari a 1 eV?
2) Quale deve essere la concentrazione di elettroni perché il fattore riempimento della prima ZB sia pari a $\pi/4$ a T=0? Si fa presente che, in 2D, $k_F = 2\sqrt{\pi n^{2D}}$
3) Si consideri ora un gas di elettroni quasi liberi nello stesso reticolo di cui sopra. Si domanda quale sia la larghezza di banda ΔE nella direzione (10) della prima ZB se il potenziale reticolare è dato da $V(\bar{r}) = V_0\left(\cos\frac{2\pi x}{a} + \cos\frac{2\pi y}{a}\right)$, con V_0 = -0.1 eV.
4) **Per i soli studenti del prof. Capizzi**
Se su ciascun sito di questo reticolo disponiamo atomi tutti uguali, con due elettroni per atomo, il cristallo sarà un isolante o un quasi metallo, e perché?
5) **Per i soli studenti del prof. Capizzi**
Per quale valore di V_0 si ha la transizione da quasi metallo a isolante a T=0? Si supponga sempre valida l'approssimazione dell'elettrone quasi libero e si discuta la validità di tale approssimazione nel caso presente.
$m_0 = 9{,}1\times10^{-31}$ kg ; $\hbar = 1.05\times10^{-34}$ J $\cdot$ s ; $e = 1{,}6\times10^{-19}$ C .

Esercizio 2
In un ipotetico semiconduttore intrinseco a gap diretta, le densità dei portatori sono n_i(300 K) = $4{,}2\times10^{13}$ cm^{-3} e n_i(350 K) = $6{,}8\times10^{14}$ cm^{-3}.
A) Trovare il valore della gap proibita in eV.
B) Il semiconduttore abbia un reticolo cubico semplice con due atomi per cella, di masse pari a 5 e 10 u. m. a. e costante elastica C = 12 N/m. Ricordando che le frequenze delle branche acustiche e ottiche sono date, rispettivamente, da

$$0; \left[2C\left(\frac{1}{M_1}+\frac{1}{M_2}\right)\right]^{\frac{1}{2}} \text{ rad/s}$$

a k = 0 e da

$$\left(\frac{2C}{M_1}\right)^{\frac{1}{2}}; \left(\frac{2C}{M_2}\right)^{\frac{1}{2}} \text{ rad/s}$$

a bordo zona, disegnare schematicamente l'andamento del coefficiente di assorbimento ottico $\alpha(E)$ del semiconduttore, su una scala da E = 0 a E = 1 eV.
C) Sapendo che a 300 K la costante di Hall del semiconduttore è

$$R_H = \frac{1}{e}\frac{n\mu_n^2 - p\mu_p^2}{\left(n\mu_n + p\mu_p\right)^2} = 0{,}12 \text{ m}^3/\text{C}$$

e che la differenza tra le mobilità degli elettroni e delle lacune è

$$\mu_n - \mu_p = 0{,}75 \text{ m}^2/\text{V}\cdot\text{s}$$

trovare la conducibilità elettrica del semiconduttore a temperatura ambiente.
1 u. m. a. = $1{,}66\times10^{-27}$ kg; $\hbar = 1{,}05\times10^{-34}$ J $\cdot$ s

Soluzioni

Esercizio 1

1) Per un elettrone libero l'energia è data da

$$E = \frac{\hbar^2}{2m_0}k^2$$

e la prima ZB nel caso dato è costituita da un reticolo quadrato di lato $2\pi/a$.
Pertanto la minima energia per elettroni sul perimetro di tale quadrato si ha per un elettrone al centro del lato [k=π/a, minimo valore del modulo di k sul perimetro della prima ZB), la massima per un elettrone allo spigolo ($k = \sqrt{2}\pi/a$, massimo valore del modulo di k sul perimetro della prima ZB), per cui

$$\Delta E^M = E\left(\frac{\pi}{a},\frac{\pi}{a}\right) - E\left(\frac{\pi}{a},0\right) = \frac{\hbar^2}{2m_0}\left[\left(\frac{\sqrt{2}\pi}{a}\right)^2 - \left(\frac{\pi}{a}\right)^2\right] = \frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{\pi^2}{a^2}$$

Ne segue

$$\Delta E^M = \frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{\pi^2}{a^2} = 1eV = 1.6\times10^{-19}\,J$$

$$a = \frac{\hbar\pi}{\sqrt{1.6\times10^{-19}\times2m_0}} = \frac{1.054\times10^{-34}\times3.14}{\sqrt{1.6\times10^{-19}\times2\times9.1\times10^{-31}}} = \frac{3.31\times10^{-34}}{5.40\times10^{-25}} = 0.61\times10^{-9}\,m$$

2) A T=0 gli elettroni riempiono un cerchio di raggio pari al quasi-impulso di Fermi, k_F, per cui

$$\frac{\pi k_F^2}{(2\pi/a)^2} = \frac{\pi}{4} \quad \Rightarrow \quad k_F = \frac{\pi}{a}$$

da cui segue

$$\frac{\pi}{a} = \sqrt{4\pi n^{2D}} \quad \Rightarrow \quad n^{2D} = \frac{\pi}{4a^2} = \frac{3.14}{4\times\left(0.61\times10^{-9}\right)^2} = 2.1\times10^{18}\,m^{-2}$$

3) La forma del potenziale cristallino

$$V(r) = -0{,}1\left(\frac{e^{i2\pi x/a}+e^{-i2\pi x/a}}{2} + \frac{e^{i2\pi y/a}+e^{-i2\pi y/a}}{2}\right) = -0.05\cdot\left(e^{i2\pi x/a} - e^{-i2\pi x/a} - e^{i2\pi y/a} - e^{-i2\pi y/a}\right)$$

porta all'apertura di una gap a bordo zona (nella direzione (10) e sue equivalenti per simmetria) di 0.1 eV determinata dallo splitting simmetrico dei due stati elettronici degeneri in -π/a e +π/a.
Pertanto la larghezza di banda nella direzione (10) sarà data dall'energia dell'elettrone a bordo zona nella direzione (10) (avendo assunto energia nulla per k=0).

In conclusione

$$\Delta E = \frac{\hbar^2}{2m_0}\left(\frac{\pi}{a}\right)^2 - 0.05 = \frac{\left(1.054\times10^{-34}\right)^2}{2\times9.1\times10^{-31}}\left(\frac{3.14}{0.61\times10^{-9}}\right)^2\frac{1}{1.6\times10^{-19}} - 0.05 = 1-0.05 = 0.95\,eV$$

4) Il cristallo inizialmente sarà un quasi-metallo in quanto la gap di energia a bordo zona (0.1 eV) è molto più piccola della differenza di energia di cui al punto 1). Pertanto l'energia della seconda zona di Brillouin per molti valori di *k* sarà più bassa di quella della prima zona vicino al bordo lungo la direzione (11). In tale condizione, i due elettroni per atomo si disporranno parte nella prima zona e parte nella seconda zona di Brillouin.

5) Perché il quasi metallo diventi un isolante, quanto detto sopra non deve poter avvenire. Cio' accadrebbe ove valesse la relazione

$$\Delta E^{M} = 1eV = V_0 / 2 \quad \Longleftrightarrow \quad V_0 = -2\,eV$$

Il segno meno deriva dal fatto che il potenziale cristallino porta alla formazione del cristallo. Ovviamente in tal caso non avrebbe senso parlare di piccola perturbazione al sistema e le formule utilizzate non sarebbero corrette.

Esercizio 2

A)

$$n_i \propto T^{\frac{3}{2}}\, \boldsymbol{exp(}-E_g / 2k_B T\boldsymbol{)} \Rightarrow E_g = -2k_B T\, \boldsymbol{ln}\left(\frac{n_i}{T^{\frac{3}{2}}}\right)$$

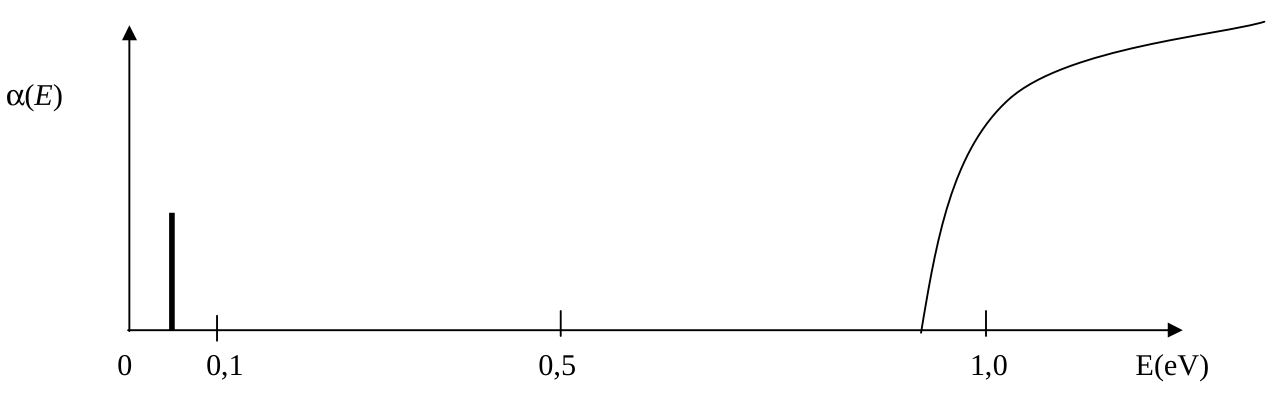
$$\frac{n_i\boldsymbol{(}350\boldsymbol{)}}{n_i\boldsymbol{(}300\boldsymbol{)}} = \frac{350^{\frac{3}{2}}}{300^{\frac{3}{2}}}\boldsymbol{exp(}-E_g / 2k_B 350 + E_g / 2k_B 300\boldsymbol{)}$$

$$E_g = \frac{2k_B}{4{,}76\times10^{-4}} \cdot \boldsymbol{ln}\left[\left(\frac{300}{350}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{n_i\boldsymbol{(}350\boldsymbol{)}}{n_i\boldsymbol{(}300\boldsymbol{)}}\right] = \frac{2\cdot 1{,}38\times10^{-16}}{4{,}76\times10^{-4}}\, 2{,}55 = 1{,}48\times10^{-12}\ \text{erg} = 0{,}92\ \text{eV}$$

B) All'interno della gap a k=0 si osserverà un solo modo, trasverso ottico doppiamente degenere, la cui energia è

$$E\boldsymbol{(}eV\boldsymbol{)} = \frac{\hbar}{1{,}60\times10^{-19}}\left[2C\frac{M_1+M_2}{M_1 M_2}\right]^{\frac{1}{2}} = \frac{1{,}05\times10^{-34}}{1{,}60\times10^{-19}}\sqrt{\frac{24\times15}{50\times1{,}66\times10^{-27}}} = 43\,\text{meV}$$

Pertanto $\alpha(E)$ avrà il seguente aspetto:



C)

$$R_H = \frac{1}{en}\frac{\mu_n - \mu_p}{\mu_n + \mu_p} \Rightarrow \mu_n + \mu_p = \frac{\mu_n - \mu_p}{enR_H} = \frac{0{,}75}{1{,}60\times10^{-19}\times4{,}2\times10^{19}\times0{,}12} = 0{,}93\,\mathrm{m}^2/\mathrm{V}\cdot\mathrm{s}$$

$$\sigma = ne(\mu_n + \mu_p) = 4{,}2\times10^{19}\times1{,}60\times10^{-19}\times0{,}93 = 6.25\,\Omega^{-1}\mathrm{m}^{-1}$$