

Bande nei cristalli - Testi degli esercizi

Fisica della Materia Condensata

Dipartimento di Matematica e Fisica

Università degli Studi Roma Tre

A.A. 2019/2020

Bande nei cristalli

1 Esercizio 1

In un reticolo lineare monoatomico di passo a e disposto lungo l'asse z , la banda di energia più bassa deriva da orbitali di tipo s e quella di energia più alta da orbitali di tipo p_z . Utilizzando il modello di tight-binding, trascurando l'integrale di sovrapposizione α e limitando l'interazione a primi vicini, scrivere la $E(q)$ per le due bande e graficarla indicando a quale q si ottiene la minima gap di energia. Siano: $|\gamma_s| = 0.5eV$, $E_g = 2eV$, $E_s - \beta_s = -13.5eV$, $E_{pz} - \beta_{pz} = -9eV$.

2 Esercizio 2

Degli atomi sono disposti su un reticolo quadrato di passo reticolare $a = 2\text{\AA}$.

- a) Scrivere la forma esplicita delle bande risultanti da orbitali di tipo s e di tipo p_y , nell'approssimazione di tight binding con interazione a primi vicini e trascurando gli integrali α e β .
- b) Determinare il valore del quasimomento \vec{q} lungo il periodo della prima zona di Brillouin per cui la differenza di energia tra le due bande raggiunge il suo massimo e determinare il valore della differenza massima di energia.

Siano: $|\gamma_s| = 0.8eV$, $|\gamma_{py}| = |\gamma_{px}| = 0.5eV$, $E_{0s} = 1.2eV$ e $E_{0p} = 4.8eV$.

3 Esercizio 3

Usando la formula del tight-binding per interazione a primi vicini e trascurando l'integrale di sovrapposizione α trovare l'espressione di $E(\vec{q})$ ed il suo valore nel punto del reticolo reciproco $\vec{q}^* = (0, 0, 0)$ per i reticoli:

- cubico semplice (sc),
- cubico a corpo centrato (bcc),
- cubico a facce centrate (fcc).

4 Esercizio 4

Gli stati elettronici di valenza di una catena lineare monoatomica infinita di passo reticolare a , sono ben descritti dall'approssimazione di elettroni indipendenti e si trovano nell'orbitale s . Gli atomi della catena sono monovalenti. Siano $E_{0s} = 1eV$, $|\gamma_s| = 1eV$, si trascurino tutte le altre interazioni e si consideri solo l'interazione a primi vicini.

- Si scriva l'espressione dell'energia della banda.
- Si determini il q di Fermi e l'energia di Fermi.
- Si determini se la catena ha comportamento metallico o isolante.
- Si consideri il caso in cui l'interazione a secondi vicini non sia trascurabile e l'integrale di sovrapposizione $|\gamma_s 2| = 0.1eV$ e si risponda alle stesse prime tre domande di questo esercizio.
- Si grafichino le bande per approssimazione a primi e a secondi vicini nella prima zona di Brillouin.

5 Esercizio 5

In un reticolo lineare di passo a disposto lungo l'asse z , con base costituita da un atomo monovalente, la banda di energia più bassa deriva da orbitali di tipo s e quella a energia più alta da orbitali di tipo p_z

Utilizzando il metodo tight-binding, trascurando l'integrale di sovrapposizione α e limitando l'interazione a primi vicini:

- a) Scrivere la $E(k)$ per le due bande.
- b) Tracciare il grafico approssimativo indicando quali stati sono occupati.
- c) Trovare i valori di k per cui si hanno la minima e massima energia di transizione a $T = 0$ per assorbimento di radiazione elettromagnetica, dandone i rispettivi valori.

Rispondere nuovamente alle domande a), b) e c) nel caso in cui la base sia costituita da un atomo bivalente, specificando per quali valori di k sono occupate le due bande.

Siano: $E_s - \beta_s = -9eV$, $E_p - \beta_p = -7.5eV$, $|\gamma_s| = 1eV$ e $|\gamma_p| = 0.75eV$.

6 Esercizio 6

Si consideri un ipotetico reticolo rettangolare nel piano xy , con distanza interatomica a lungo x e b lungo y . Un atomo bivalente con orbitali s e d_{xy} sia disposto su ciascun punto reticolare. Utilizzando il metodo del tight-binding:

- a) Scrivere l'espressione dell'energia $E(\vec{k})$ per le due bande considerando solo l'interazione a primi vicini e nulli gli integrali di sovrapposizione α . Siano: $|\gamma_{sx}| = 1eV$, $|\gamma_{sy}| = 1.5eV$, $|\gamma_{dx}| = 0.5eV$, $|\gamma_{dy}| = 1eV$, $E_s - \beta_s = 2eV$, $E_d - \beta_d = 4eV$.
- b) Con i dati del problema si determini quale sia il maggiore tra a e b .
- c) Dire se e come cambia l'espressione $E(\vec{k})$ se si sostituisce l'orbitale d_{xy} con un orbitale p_z , a parità di integrali di trasferimento $|\gamma_{px}| = 0.5eV$, $|\gamma_{py}| = 1eV$ e di energia dello stato isolato $E_p - \beta_p = 4eV$.
- d) Determinare se il cristallo al punto a è un isolante o un metallo.

7 Esercizio 7

Si consideri il sistema costituito da una catena lineare di parametro reticolare $a = 6a_0$, dove a_0 è il raggio di Bohr, composta da atomi monovalenti in cui il potenziale cristallino è rappresentato da $V(x) = V_1 \cos(\frac{2\pi x}{a}) + V_2 \cos(\frac{4\pi x}{a})$, con $V_1 = -0.16eV$ e $V_2 = -0.04eV$, vista come una perturbazione piccola all'energia degli elettroni.

- a) Determinare l'ampiezza e la posizione in q delle gap di energia.
- b) Specificare se il sistema è metallico o isolante.
- c) Determinare l'energia di Fermi e la velocità di Fermi degli elettroni.

8 Esercizio 8

Un reticolo bidimensionale a pianta rettangolare contiene $N_b = 210^7$ file atomiche lungo y e $N_a = 10^7$ atomi monovalenti per ogni fila. I parametri reticolari sono $a = 0.25$ nm lungo x e $b = 0.15$ nm lungo y . Il potenziale cristallino a cui sono soggetti gli elettroni quasi liberi è:

$$U = -U_1 \cos(\frac{2\pi x}{a}) - U_2 \cos(\frac{4\pi x}{b}), \text{ con } U_1 = 2eV \text{ e } U_2 = 2eV.$$

- a) Disegnare la prima zona di Brillouin, specificando i valori di k ai bordi zona nelle direzioni (1 0) e (0 1) e trovare i rispettivi valori delle gap di energia.
- b) Determinare la densità degli stati $g(K)$.
- c) Trovare il valore di k_F , disegnare il cerchio di Fermi nella prima zona di Brillouin e specificare se il sistema ha comportamento metallico o isolante.

9 Esercizio 9 - Esonero 2014/2015

Un elemento cristallizza nella struttura cubica semplice con parametro reticolare $a = 0.2nm$. L'elemento è trivalente e di questi tre elettroni due occupano un orbitale p_z ed uno occupa un orbitale s . Utilizzando l'approssimazione di tight-binding, trascurando l'integrale di sovrapposizione α , limitando l'interazione a primi vicini, e considerando: $E_p - \beta_p = -5.2eV$, $E_s - \beta_s = 2eV$, $|\gamma_p| = 0.6eV$ e $|\gamma_s| = 0.5eV$:

- 1) Scrivere l'espressione esplicita di $E_i(\vec{k})$ per le due bande di energia;
- 2) trovare i valori della gap interbanda E_g e la massa efficace degli elettroni di conduzione al punto $\Gamma = (0, 0, 0)$ dello spazio k ;
- 3) trovare lungo la direzione $(1,0,0)$ il modulo della velocità di gruppo \vec{v}_g e calcolarne il valore numerico nel punto $(\frac{\pi}{a}, 0, 0)$;
- 4) utilizzando il modello dell'elettrone quasi libero e assumendo una massa efficace isotropa e pari alla massa dell'elettrone libero m_0 , trovare il valore della velocità di Fermi v_F

10 Esercizio 10 - Esame I 2014/2015

Gli stati elettronici di valenza di una catena lineare monoatomica con $N = 10^{23}$ siti e di passo reticolare $a = 0.2nm$ sono ben descritti, in approssimazione di elettroni indipendenti da una base ortonormale di due diversi orbitali (A e B) entrambi di tipo s su ciascun sito della catena. Gli elementi di matrice dell'Hamiltoniana elettronica sono tutti nulli salvo quelli diagonali (stesso orbitale e stesso sito), che valgono rispettivamente $\epsilon_A = -1eV$ e $\epsilon_B = 4eV$, e quelli fra orbitali dello stesso tipo centrati sui primi vicini, che valgono rispettivamente $t_A = 3eV$ e $t_B = 1eV$. Gli atomi della catena sono bivalenti ed il sistema si trova allo zero assoluto. Dopo aver scritto le espressioni delle due bande $E_A(k)$ e $E_B(k)$ ed averne tracciato un grafico approssimativo:

- 1) si determini l'energia di Fermi E_F del sistema;
- 2) si stabilisca se il modello ha comportamento metallico o isolante;
- 3) si calcolino le velocità di gruppo degli elettroni con energia E_F ;
- 4) si calcoli il valore dell'energia elettronica totale E_{TOT} .

11 Esercizio 11 - Esame II 2014/2015

Si consideri un ipotetico reticolo quadrato nel piano xy , con distanza interatomica a ed un atomo monovalente di orbitale f_s su ogni sito. Per l'orbitale

considerato si ha $E_0 = 3eV$. Il valore in module dell'integrale di trasferimento tra due siti primi vicini lungo x è $|\gamma_x| = 0.5eV$ e lungo y è $|\gamma_y| = 0.3eV$.

Utilizzando il metodo del legame forte e trascurando gli integrali di sovrapposizione β e α :

- 1) Scrivere l'espressione della banda risultante in approssimazione a primi vicini.
- 2) Disegnare l'andamento delle bande di energia nelle direzioni (1,0) e (0,1) della prima zona di Brillouin e valutare la larghezza di banda in questo grafico, le direzioni sono fornite in unità di π/a .
- 3) Ricavare le componenti della masse efficace e calcolarne il valore numerico per un elettrone a centro zona. Sia il parametro reticolare $a = 0.22nm$.
- 4) Si includa l'interazione a secondi vicini, scrivere l'espressione della nuova banda e rivalutarne la larghezza lungo le stesse direzioni. Sia l'integrale di trasferimento tra due atomi secondi vicini $\gamma = -0.1ev$.