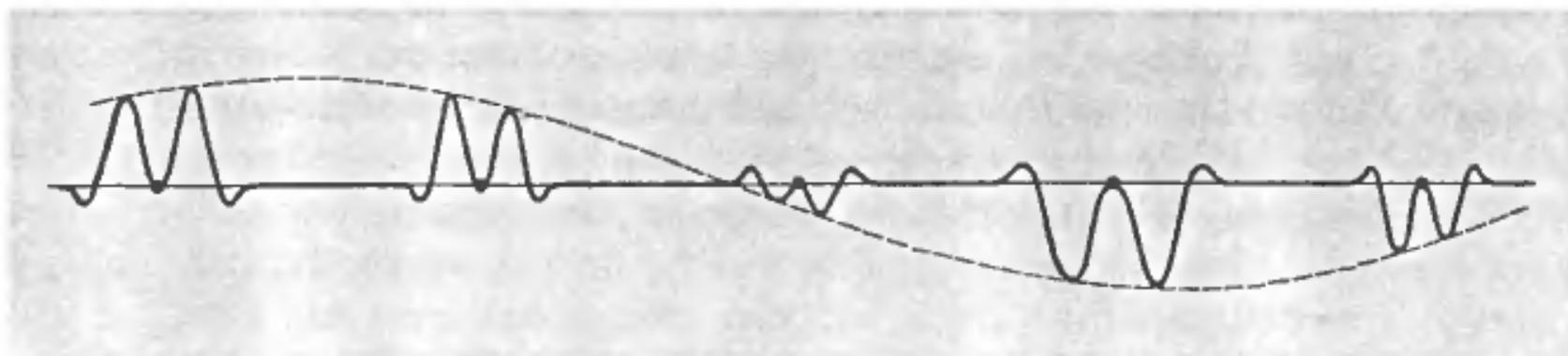


**Figure 10.6**

A tight-binding calculation of the  $3d$  bands of nickel. (G. C. Fletcher, *Proc. Phys. Soc.* A65, 192 (1952).) Energies are given in units of  $\epsilon_0 = 1.349$  eV, so the bands are about 2.7 volts wide. The lines along which  $\epsilon$  is plotted are shown in Figure 10.5. Note the characteristic degeneracies along  $\Gamma X$  and  $\Gamma L$ , and the absence of degeneracy along  $\Gamma K$ . The great width of the bands indicates the inadequacy of so elementary a treatment.



- **Figure 10.7**  
Characteristic spatial variation of the real (or imaginary) part of the tight-binding wave function (10.6).

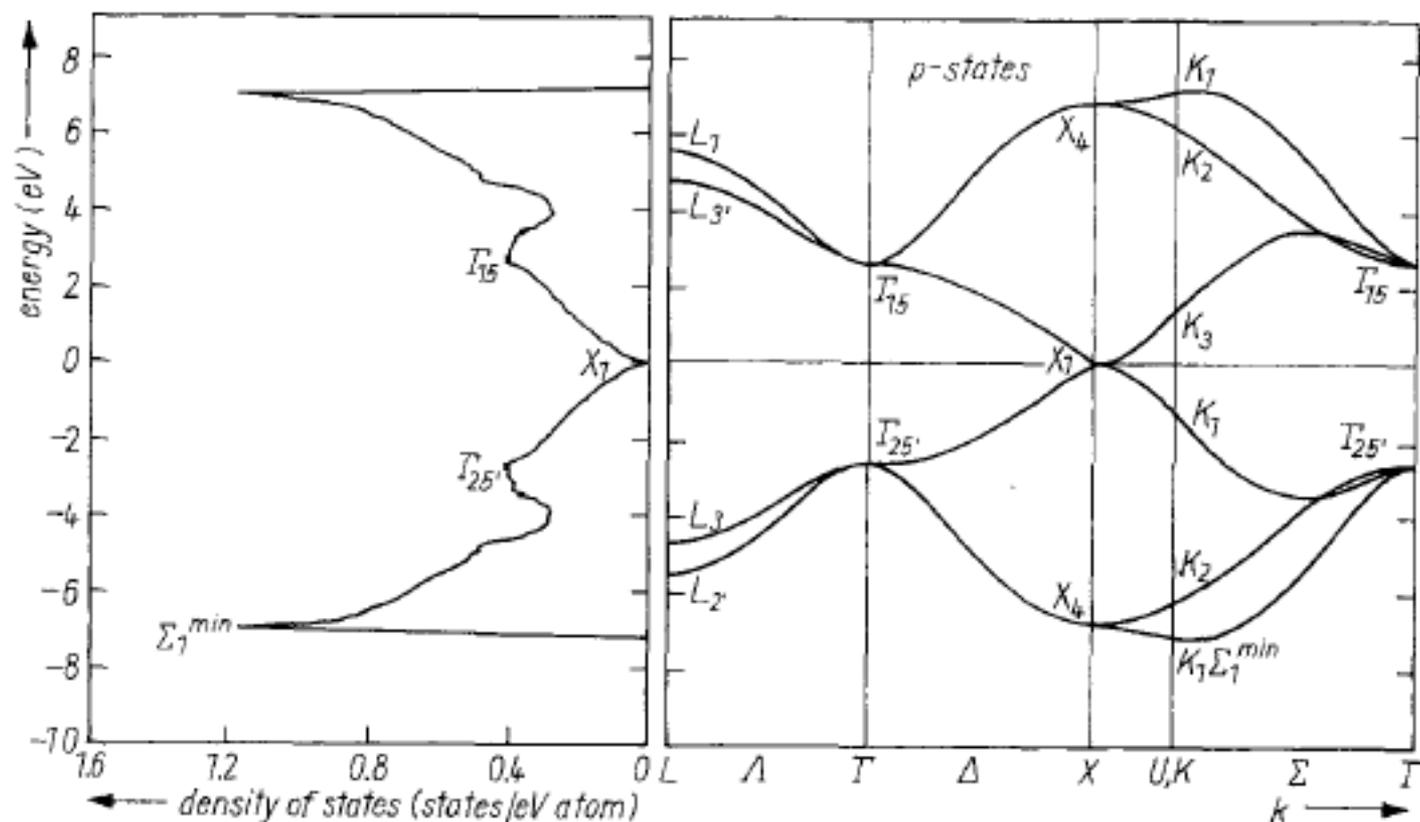


Fig. 2. Band structure and density of states of p-states for diamond structure crystals

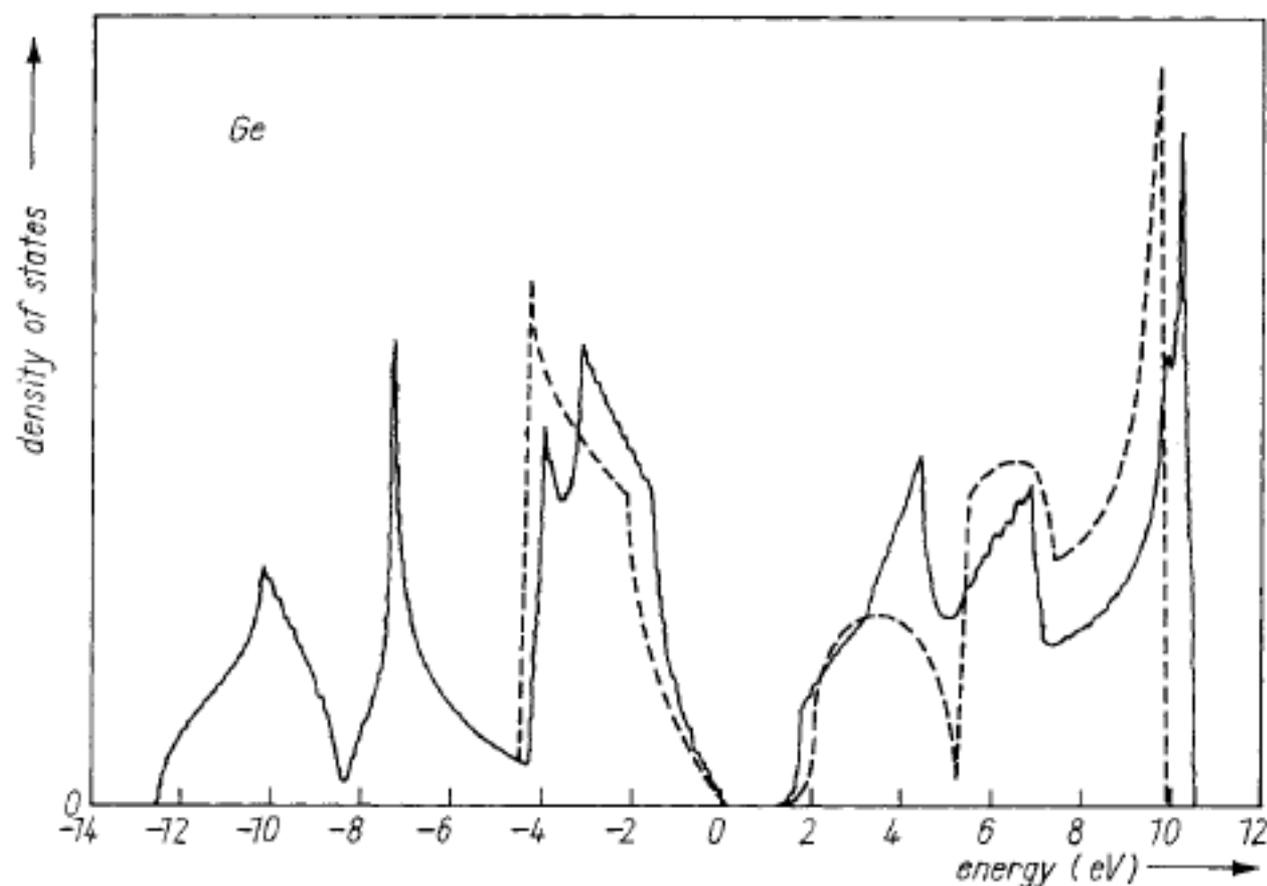
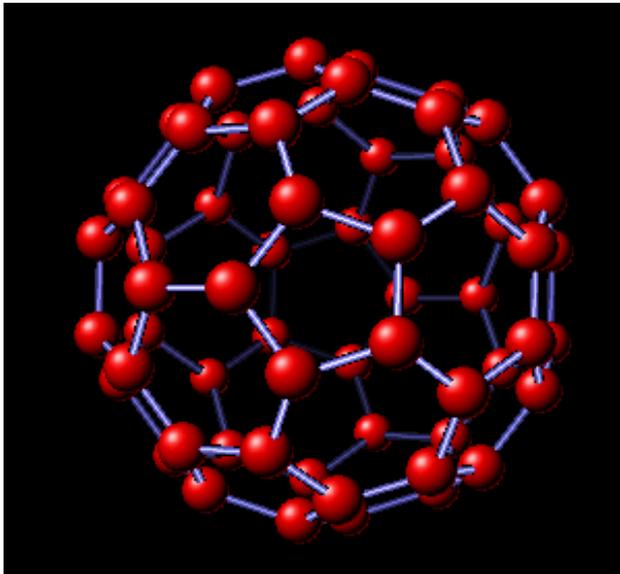


Fig. 4. The density of states (in arbitrary units) of Ge with and without second-nearest-neighbor interaction. The second-nearest-neighbor interaction splits the energies at X and W and gives rise to extra structure in the density of states. --- Nearest-neighbor interaction, — one second-nearest-neighbor interaction

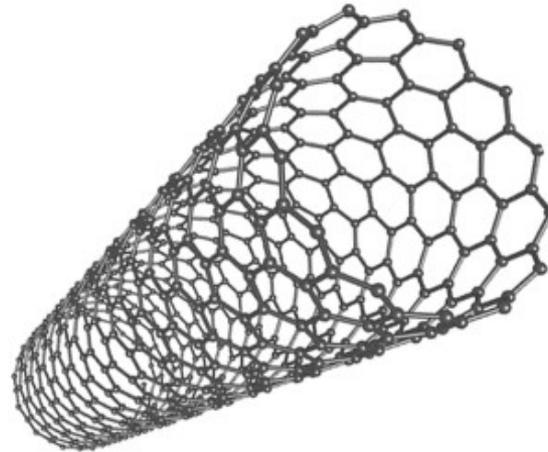
# Nanotubi di Carbonio

- Scoperti nel 1985 dal chimico R. Smalley
- Gli atomi di carbonio formano fullereni e da questi rilassano in strutture arrotolate cilindriche
- Possono essere a parete singola o a parete multipla

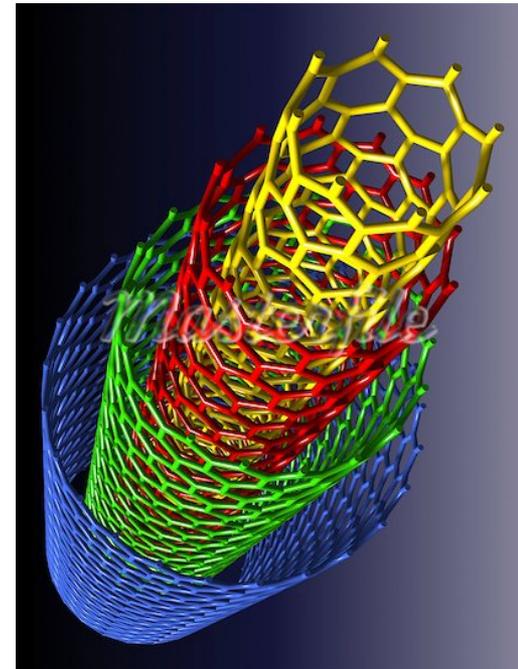
C60



SWNTs

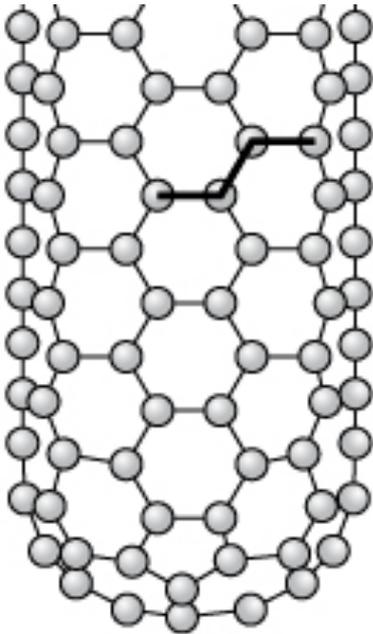


MWNTs

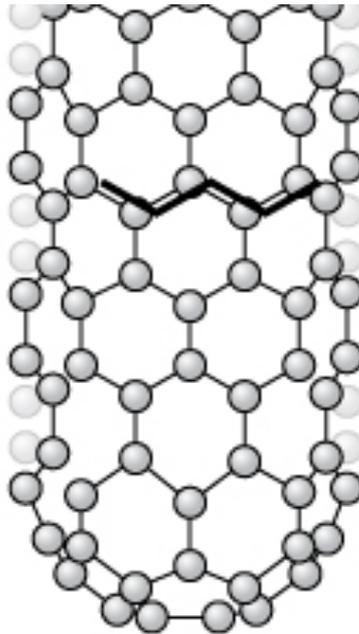


# Tight Binding per Nanotubi di Carbonio

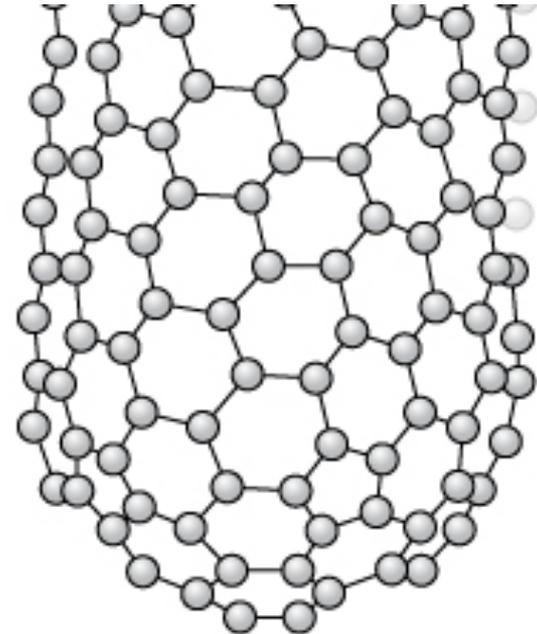
Le proprietà elettriche dipendono da come sono orientati gli esagoni lungo l'asse del tubo. In figura tre possibili orientazioni. Nella armchair gli esagoni sono allineati parallelamente all'asse del tubo e hanno proprietà elettriche simili ai metalli. Se si applica una ddp tra i due estremi passa corrente in maniera più efficiente rispetto per esempio al rame (comunemente usato nei circuiti).



Armchair



Zigzag



Chiral

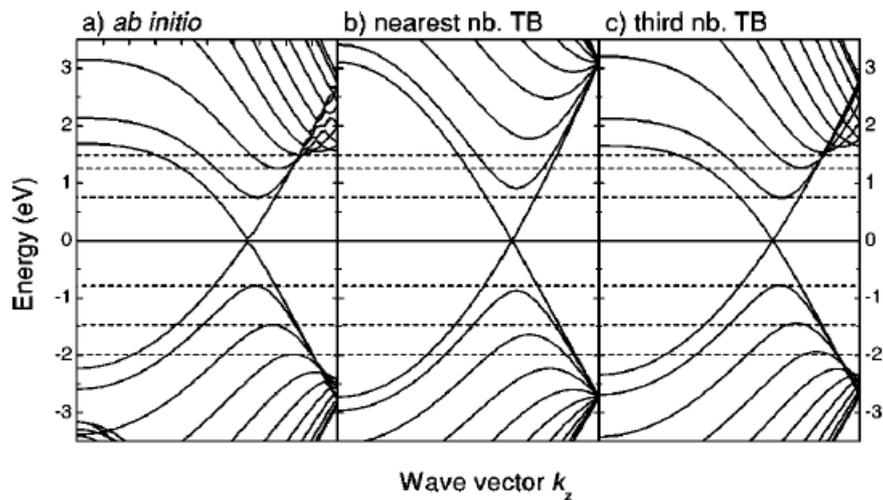


FIG. 4. Band structure of a (10,10) armchair nanotube. (a) *Ab initio* calculation. (b) Nearest-neighbor tight-binding calculation with  $\gamma_0 = -2.7$  eV. (c) Third-nearest-neighbor tight-binding calculation with parameters obtained from a fit to the optical energy range; see Table I. The dashed lines denote *ab initio* calculated energies of the singularities in the density of states.

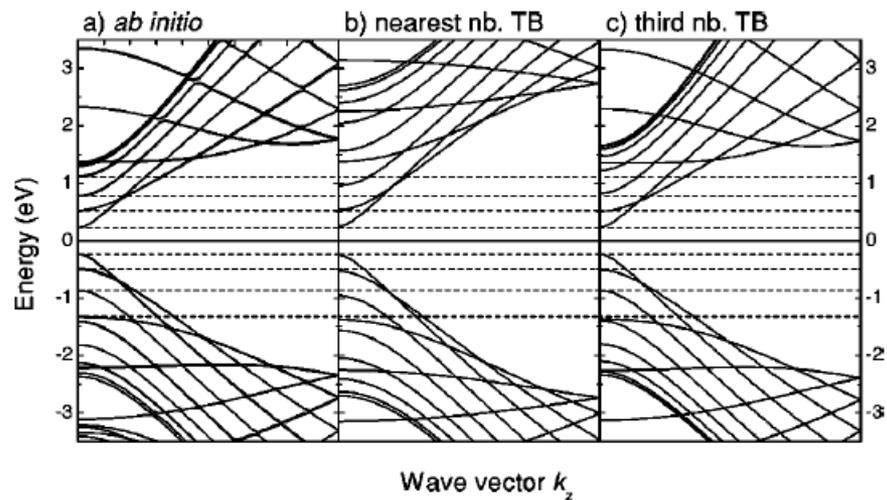
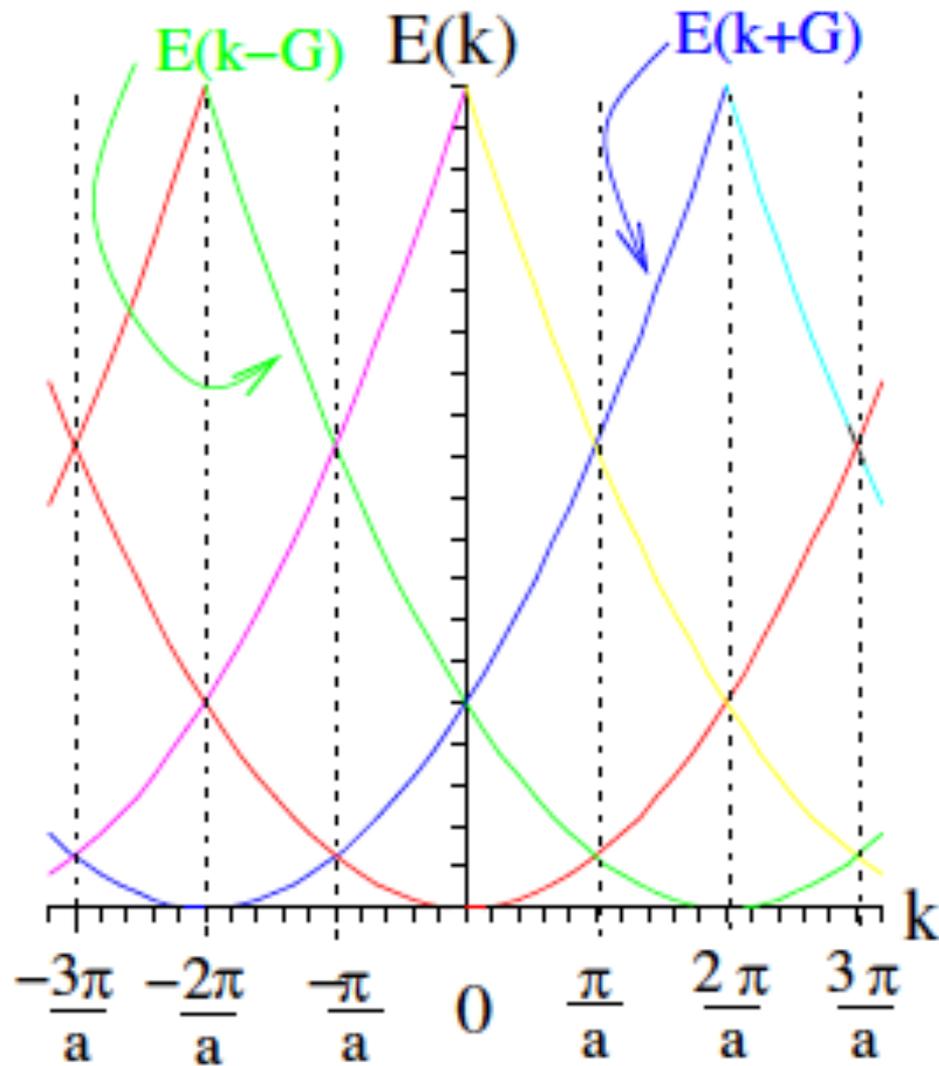


FIG. 5. Band structure of a (19,0) zigzag nanotube. (a) *Ab initio* calculation. (b) Nearest-neighbor tight-binding calculation with  $\gamma_0 = -2.7$  eV. (c) Third-nearest-neighbor tight-binding calculation with parameters obtained from a fit to the optical energy range; see Table I. The dashed lines denote *ab initio* calculated energies of the singularities in the density of states.

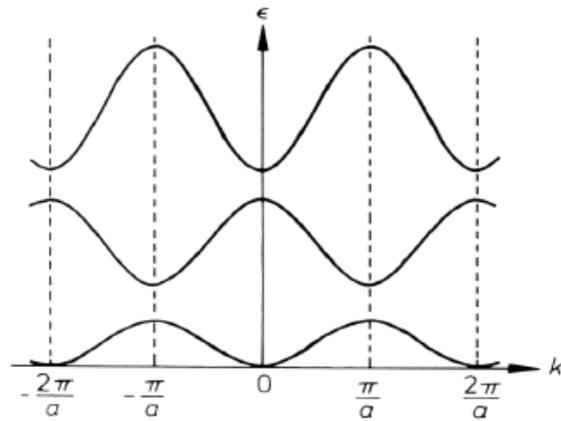
Struttura a bande nel limite per  $V(r)$  che tende a 0



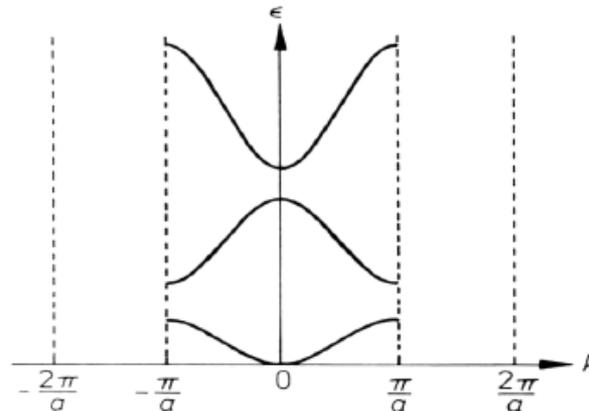
(b)

- Zona Ripetuta: si vedono bene le bande a diverso  $E_n$
- Zona Ridotta: contiene tutta l'informazione fisica rilevante
- Zona Estesa: si osserva bene l'effetto dei piani di Bragg

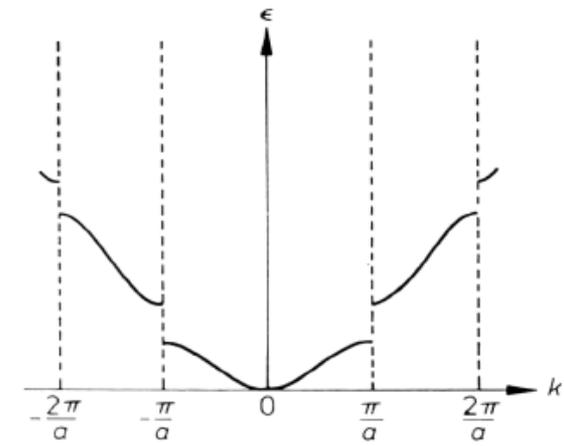
Zona Ripetuta



Zona Ridotta



Zona Estesa



# Proprietà elettroniche di cristalli selezionati

## STRUTTURA A BANDE DI CRISTALLI DI GAS RARI

- Cristallizzano FCC con struttura a shell chiusa.
- Escludiamo l'He come già detto. Gli elettroni di core si muovono su bande praticamente non disperse e pienamente occupate.
- Le bande di valenza vengono dagli stati p anch'essi pienamente occupati e tight binding like.
- Hanno gap molto grandi e le bande di conduzione sono quasi di elettrone libero.
- Il Neon solido, con una gap di energia di circa 21.5 eV è il cristallo con la più grande gap di energia.

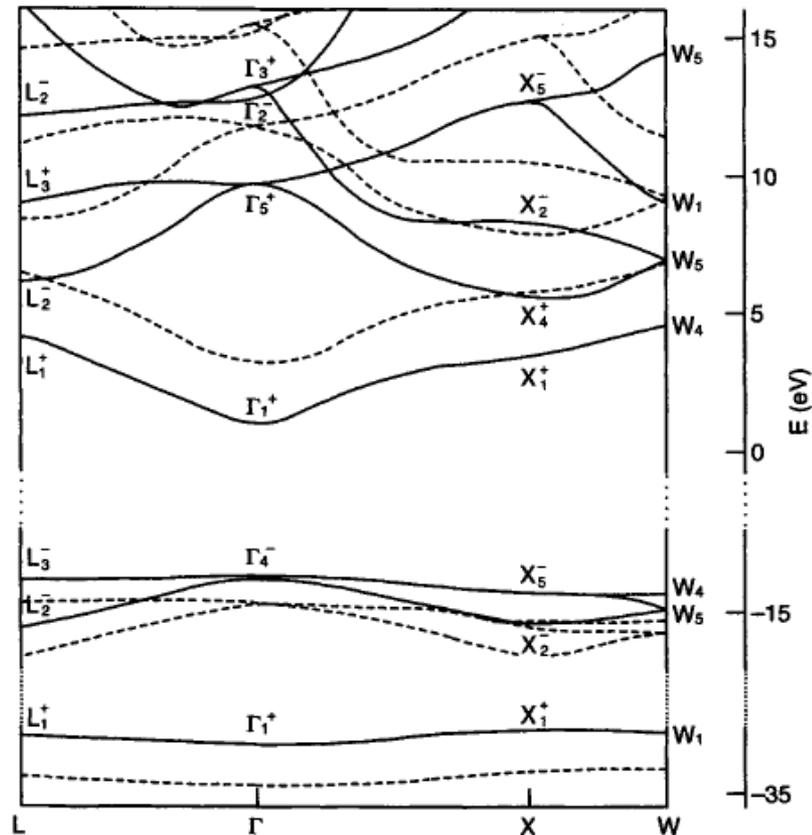


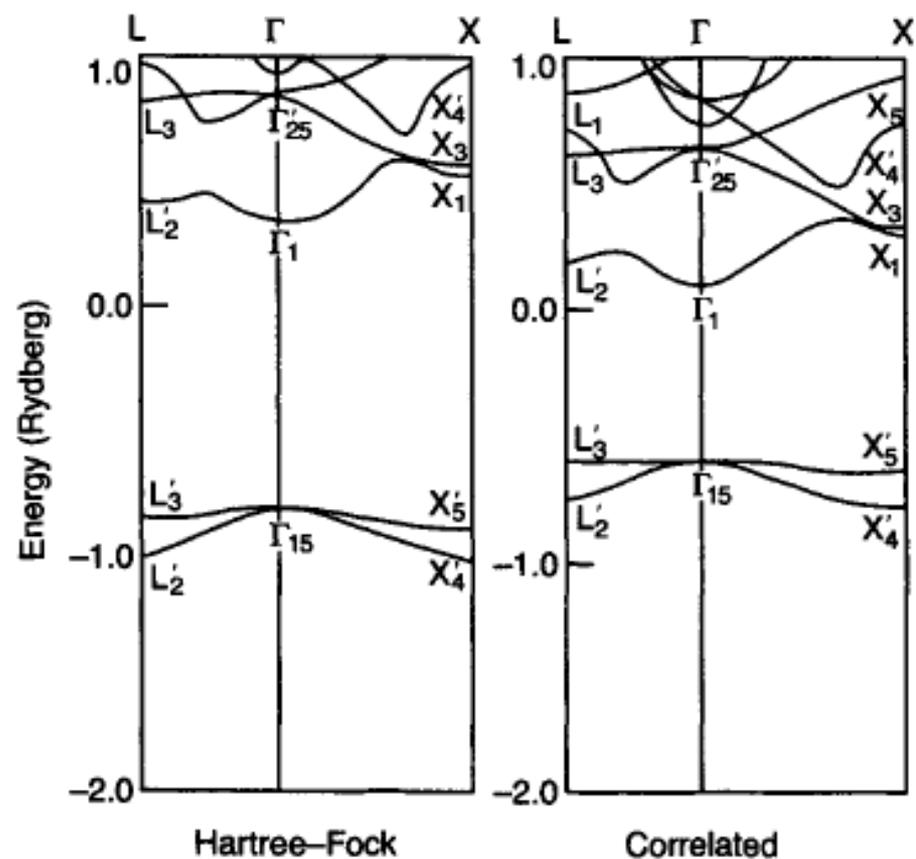
Fig. 1 Energy bands of solid argon with inclusion of correlation effects (solid line). For comparison the energy bands in the Hartree-Fock approximation are also reported (dashed lines); correlation effects shift (almost rigidly) the Hartree-Fock conduction bands to lower energies, and the Hartree-Fock valence bands to higher energies [from S. Baroni, G. Grosso and G. Pastori Parravicini, Phys. Rev. B29, 2891 (1984); copyright 1984 by the American Physical Society].

**Table 1** Relevant parameters of the band structure of rare-gas solids as obtained from experiments. The energies are in eV [from N. Schwentner, F.-J. Himpsel, V. Saile, M. Skibowski, W. Steinmann and E. E. Koch, Phys. Rev. Lett. **34**, 528 (1975); copyright 1975 by the American Physical Society].

	Ne	Ar	Kr	Xe
band-gap energy $E_G$	21.7	14.2	11.6	9.3
top valence band $E(\Gamma_4^-)$	-20.3	-13.8	-11.9	-9.8
bottom conduction band $E(\Gamma_1^+)$	1.4	0.4	-0.3	-0.5
valence band width	1.3	1.7	2.3	3.0
$\Delta_{SO}^{(gas)}$	0.14	0.22	0.67	1.31
$\Delta_{SO}^{(solid)}$	$\approx 0.1$	0.2	0.64	1.3

# STRUTTURA A BANDE DI CRISTALLI IONICI

- Concentriamoci sugli alogenuri alcalini (NaCl, KBr etc.)
- Sono di solito isolanti con grandi gap. Possiamo ricavare proprietà generali dall'energia di Madelung.
- Per esempio nel caso NaCl il  $\text{Cl}^-$  ( $3s^2 3p^6$ ) l'energia dell'orbitale 3p del  $\text{Cl}^-$  è data dall'energia (negativa) di ionizzazione dello ione  $\text{Cl}^-$   $-3,7\text{eV}$ . Un elettrone nell'orbitale 3p sente l'energia di Madelung dovuta agli ioni intorno (nell'approssimazione point-ion)  $-9\text{eV}$ . La somma delle due dà la stima della posizione della banda di valenza  $-12,7\text{eV}$ .
- Con lo stesso ragionamento sulla banda di conduzione si stima  $E_c$  (originata dal livello 3s del catione  $\text{Na}^+$ ) ed  $E_g$  si calcola come differenza.



**Fig. 7** Hartree-Fock and correlated energy bands of NaCl. The state  $\Gamma_{15}$  is the top of the valence bands and the state  $\Gamma_1$  is the bottom of the conduction bands [from A. B. Kunz, Phys. Rev. B26, 2056 (1982); copyright 1982 by the American Physical Society].

# STRUTTURA A BANDE DI CRISTALLI CON LA STRUTTURA A DIAMANTE DEL GRUPPO IV

- Cristallizzano nella struttura del diamante, sono solidi covalenti, a shell aperta.
- Ci sono diamante ( $C$   $2s^2 2p^2$ ), silicio ( $Si$   $3s^2 3p^2$ ) e germanio ( $Ge$   $4s^2 4p^2$ ).
- Il diamante e' un forte isolante con gap di 5.48 eV,  $Ge$  e  $Si$  sono semiconduttori con gap di 0.74 e 1.17 eV rispettivamente.

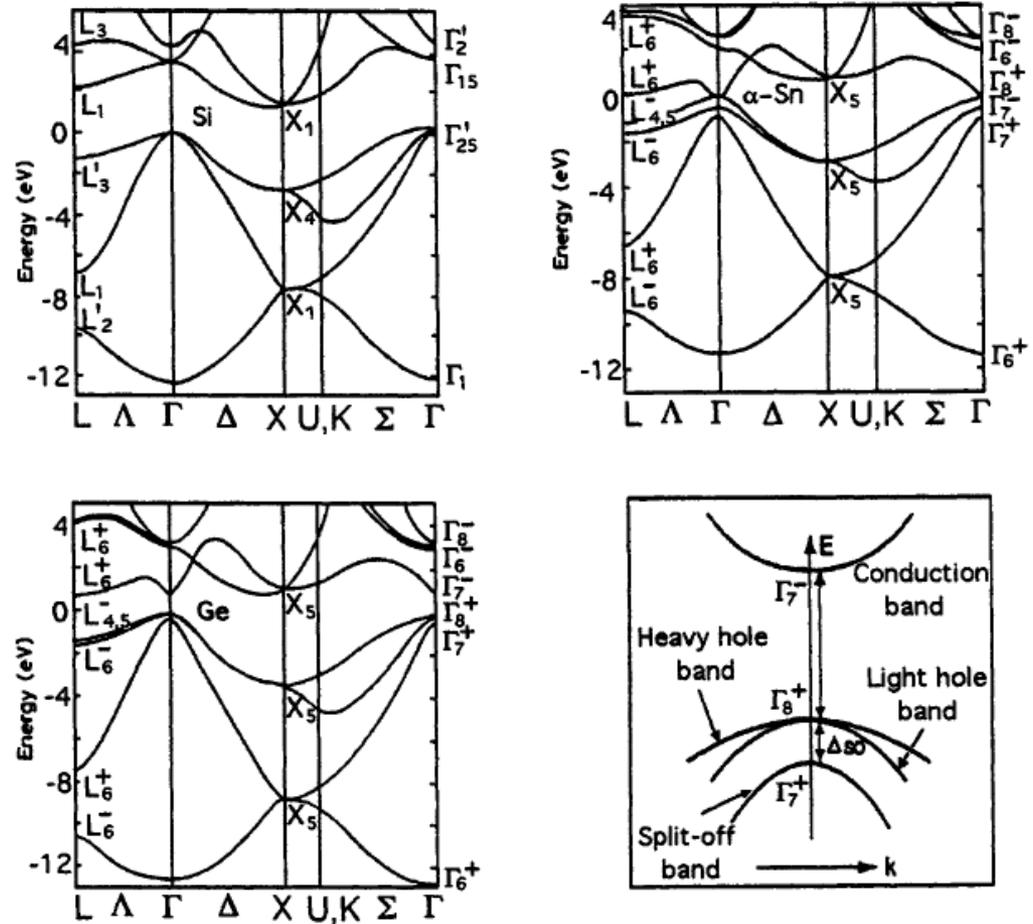


Fig. 8 Band structure for silicon, germanium and grey-tin [from J. R. Chelikowsky and M. L. Cohen, Phys. Rev. B14, 556 (1976); copyright 1976 by the American Physical Society]. The typical band structure of cubic semiconductors near the gap at  $k = 0$  is also schematically reported;  $\Delta_{so}$  denotes the spin-orbit splitting.

# STRUTTURA A BANDE DI CRISTALLI METALLICI

- E' lo stato piu' comune per i cristalli
- Di più di 100 elementi circa 70 sono metalli
- Molto importante per i metalli è la determinazione della superficie di Fermi
- Nel rame le bande di conduzione disperse vengono dal 3d e 4s

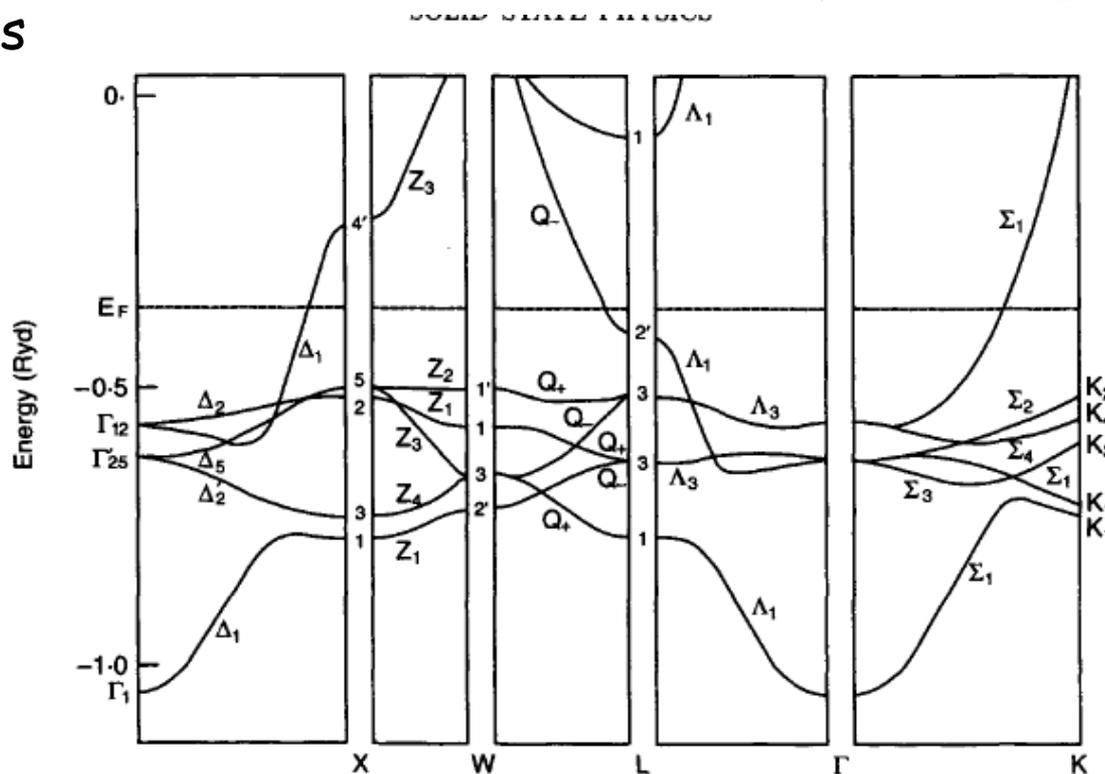
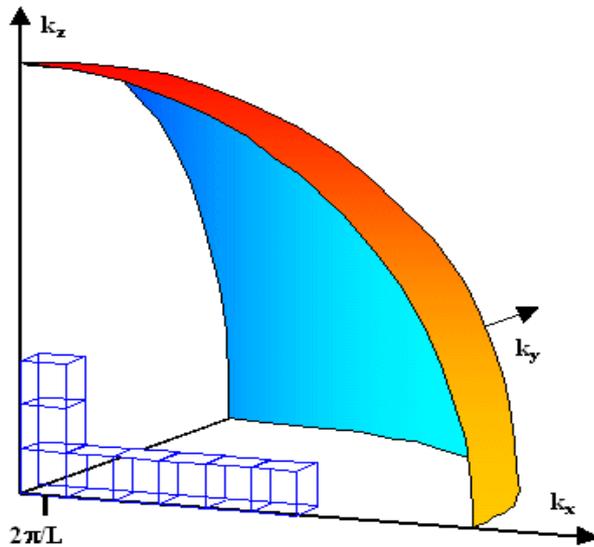


Fig. 13 Band structure of copper [from G. A. Burdick, Phys. Rev. **129**, 138 (1963); copyright 1963 by the American Physical Society].

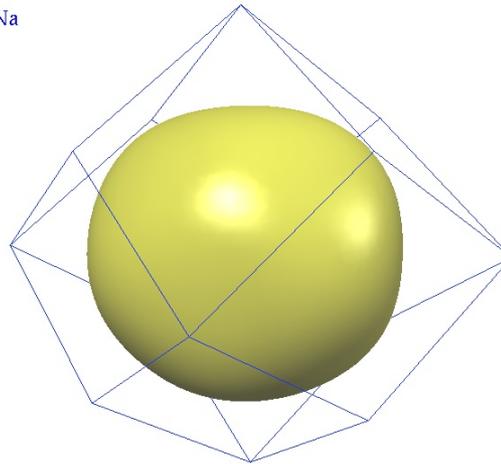
# Sommerfeld vs. Bloch: Superficie di Fermi 3D

## Sommerfeld: Sfera di Fermi

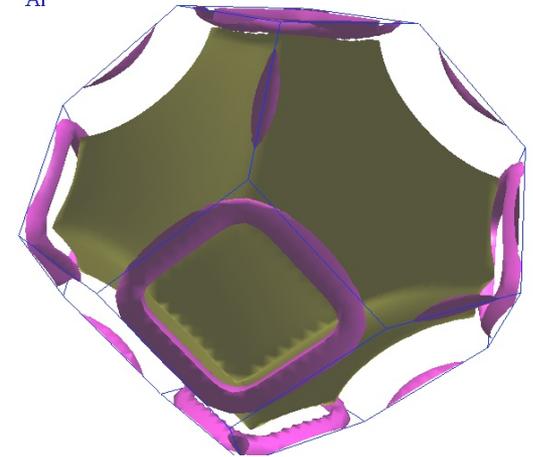


**Bloch:** qualche volta è una sfera ma più spesso qualcos'altro

Na



Al



Per ogni banda parzialmente riempita ci sarà una superficie nello spazio reciproco che separa i livelli occupati da quelli non occupati. L'insieme di tutte queste superfici è noto col nome di superficie di Fermi e rappresenta la generalizzazione agli elettroni di Bloch della sfera di Fermi. Le parti della superficie di Fermi che originano da singole bande parzialmente riempite si chiamano branche della superficie di Fermi: per averle per ogni  $n$  si risolve l'equazione in  $k$ :

$$\varepsilon_n(\mathbf{k}) = \varepsilon_F$$

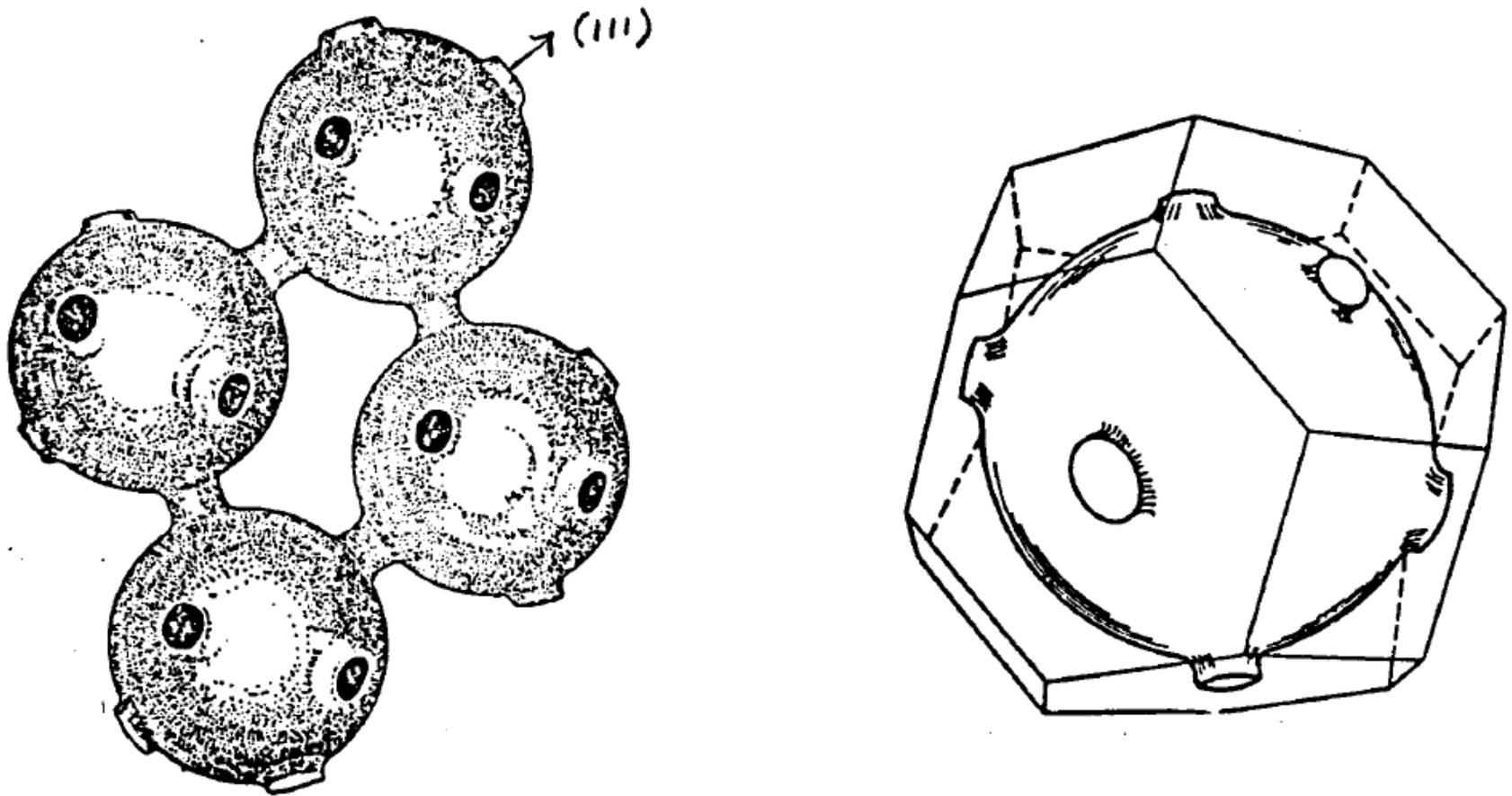


Figure 2.6: (a) The copper Fermi surface in the extended zone scheme. (b) A sketch of the Fermi surface of copper inscribed within the FCC Brillouin zone.