Corso di

Fisica dello Stato Solido

A.A. 2001/2002
Università di Camerino

Prof. Andrea Di Cicco

INFM, Dipartimento di Fisica
Università di Camerino, via Madonna delle Carceri
62032 Camerino (MC), Italy
http://www.unicam.it, http://gnxas.unicam.it

LaTeX Compuscript by Silena Faggioni

Appendice

Esercizi proposti

Esercizio 1

<u>Elettroni liberi in due dimensioni</u>
Assumiamo di avere un reticolo quadrato di spaziatura a. Vogliamo esaminare la struttura a bande intorno al punto $(\pi/a, \pi/a)$ nello spazio reciproco. Lo spettro "libero" è quattro volte degenere in questo punto e solo le componenti $\mathbf{G}= (0, 2\pi/a)$ e $\mathbf{G} = (2\pi/a, 2\pi/a)$ di $V_{\mathbf{G}}$ sono importanti.
Trovare la gap se $V_{(0,2\pi/a)} = V_0$ e $V_{(2\pi/a,2\pi/a)} = 0$ oppure se $V_{(0,2\pi/a)} = 0$ e $V_{(2\pi/a,2\pi/a)} = V_1$.

Esercizio 2

Consideriamo un gas di elettroni di massa m in due dimensioni. Disegnare le bande di energia $E(\mathbf{q})$ nel limite di potenziale debole lungo le linee $\Gamma - X$, $\Gamma - W$, $W - X$.

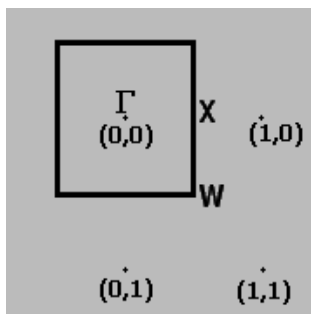


Figure 1: Cella unitaria nello spazio reciproco con i punti Γ, W e X indicati.

Esercizio 3

Consideriamo una struttura esagonale *close-packed* con potenziale periodico $V(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} V_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}}$.

a) Mostrare che $V_{\mathbf{G}} = 0$ per $\mathbf{G}$ corrispondente al bordo zona di Brillouin nella direzione dell'asse c (cioè la normale alla faccia è nella direzione (0, 0, 1)).

b) Spiegare cosa comporta questo risultato per la *gap* di energia in approssimazione di elettrone quasi libero sui punti della faccia considerata.

c) Mostrare che non è possibile ottenere un isolante costituito da atomi monovalenti per una struttura *hcp*.

[*hcp*: un atomo in (0, 0, 0) e un atomo in (2/3, 1/3, 1/2)]

Esercizio 4

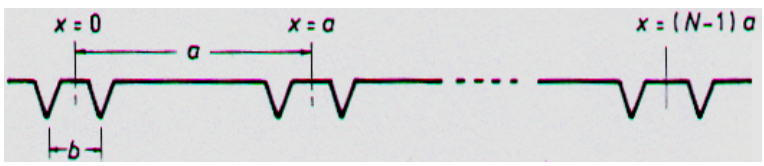
Il sodio metallico cristallizza in una struttura *bcc* (con a =4.23 Å) ed ha un elettrone di valenza per atomo.
Trovare l'espressione che definisce le transizioni interbanda ed in particolare la soglia di assorbimento interbanda (λ in Å) usando il fatto che k_F è minore di k_{IZB}, il vettore k corrispondente alla zona di confine più vicina all'origine.

Esercizio 5

Consideriamo un solido unidimensionale di lunghezza $L = na$ composto da N molecole biatomiche di distanza interatomica b ($b < \frac{a}{2}$). Il centro di ogni molecola dista a da quello della molecola successiva. Schematizziamo il potenziale come una somma di funzioni δ centrate su ogni atomo

$$V(x) = -A \sum_{n=0}^{N-1} \left[\delta\Big(x - na + \frac{b}{2}\Big) + \delta\Big(x - na - \frac{b}{2}\Big) \right]$$

con $A > 0$ e $n\epsilon[0,\, N-1]$.



a) Nel limite di elettrone libero (V = 0) determinare i valori permessi di di k e il coefficiente di normalizzazione per la funzione d'onda.

b) Esprimendo $V(x) = \sum_q V_q e^{iqx}$ trovare i valori permessi di q e i coefficienti V_q.

Esercizio 6

Consideriamo un solido unidimensionale come quello del precedente esercizio con il potenziale schematizzato nello stesso modo. Assumendo A piccolo, mostrare che per certi valori di k ci sono delle *gaps* di energia. Trovare un'espressione per le *gaps* e calcolare la *gap* a bordo zona mostrando che questa è proporzionale a $\cos(\frac{\pi b}{a})$.

Esercizio 7

Consideriamo una catena lineare di passo a in cui è definito un potenziale $V(x) = aV_0\delta(x)$ per ogni sito atomico. Ogni atomo è monovalente con elettroni di massa m. La funzione d'onda si può scrivere come $\psi = \sqrt{q}e^{-q|x|}$ con

$q = -\frac{aV_0 m}{\hbar^2}$ ed $E = -\frac{\hbar^2 q^2}{2m}$, $[V_0 < 0]$.
Usando l'approssimazione "tight - binding", che nel caso unidimensionale dà luogo alla relazione $E(q) = E_0 - \frac{\beta + 2\gamma cosqa}{1+2\alpha cosqa}$, calcolare la larghezza della banda di energia più bassa (nel limite di potenziale forte $qa >> 1$).

Esercizio 8

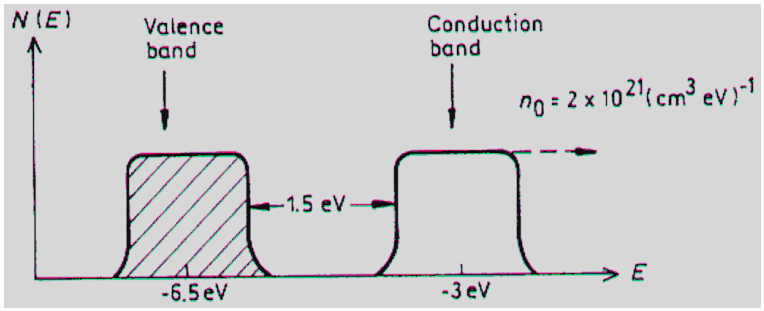
Consideriamo ancora la catena lineare dell'esercizio 7 ($V(x) = aV_0\delta(x)$).
Dimostrare la relazione $k = \alpha V_0$ con $\alpha = \frac{ma}{\hbar^2}$ e che l'energia ed il vettore d'onda della funzione d'onda di Bloch $\psi_k = e^{ikx}u_k(x)$ soddisfano le relazioni

$$\cos ka = \frac{k}{K}\sin Ka + \cos Ka$$
$$E = \frac{\hbar^2 K^2}{2m}$$

Discutere le relazioni rispetto al segno di V_0.

Esercizio 9

Consideriamo un semiconduttore intrinseco la cui densità degli stati è rappresentata in figura.



a) Dove è il livello di Fermi rispetto alle bande di valenza e di conduzione?

b) Stimare la densità degli elettroni di conduzione a temperatura ambiente.

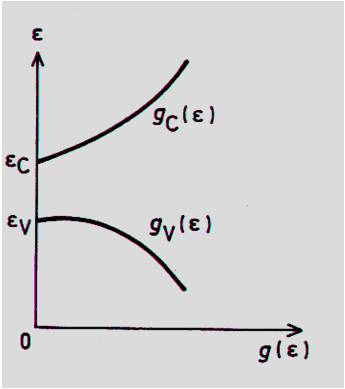
Esercizio 10

Consideriamo un semiconduttore intrinseco. Siano E l'energia di un elettrone, $g_C(E)$ e $g_V(E)$ le densità degli stati per le bande di conduzione e di valenza. Assumiamo $E_C - E_F >> k_B T$, $E_F - E_V >> k_B T$ e

$$g_C(E) = C_1(E - E_C)^{1/2}$$
$$g_V(E) = C_2(E_V - E)^{1/2}$$

a) Trovare un'espressione per la densità di elettroni n nella banda di conduzione in funzione di $k_B T$, C_1, E_C, E_F e di un definito integrale adimensionale.

b) Trovare un'espressione per la densità di lacune nella banda di valenza in funzione di $k_B T$, C_2, E_V, E_F e di un definito integrale adimensionale.

c) Trovare un'espressione per $E_F(T)$.

d) Spiegare come potrebbero cambiare i risultati drogando il materiale con donori.