

Conduktivita': legata al trasporto di carica nel cristallo

Elettrone: Pacchetto d'onde \rightarrow Vel. elettrone = Vel. di gruppo

$$\rightarrow \mathbf{v} = \nabla_{\mathbf{k}} \omega = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon$$

$$\rightarrow \mathbf{F} = m^* \mathbf{a} = m^* \frac{d\mathbf{v}}{dt} = m^* \underbrace{\nabla_{\mathbf{k}} \mathbf{v}}_{\nabla_{\mathbf{k}v_x}, \nabla_{\mathbf{k}v_y}, \nabla_{\mathbf{k}v_z}} \frac{d\mathbf{k}}{dt} = \frac{m^*}{\hbar^2} \underbrace{\frac{d^2 \varepsilon}{d\mathbf{k}^2}}_{\nabla_{\mathbf{k}} \mathbf{v}} \frac{d(\hbar \mathbf{k})}{dt}$$

$$\left. \begin{array}{l} \mathbf{p} = \hbar \mathbf{k} \\ \mathbf{F} = \frac{d\mathbf{p}}{dt} \end{array} \right\} \rightarrow \frac{m^*}{\hbar^2} \frac{d^2 \varepsilon}{d\mathbf{k}^2} = 1$$

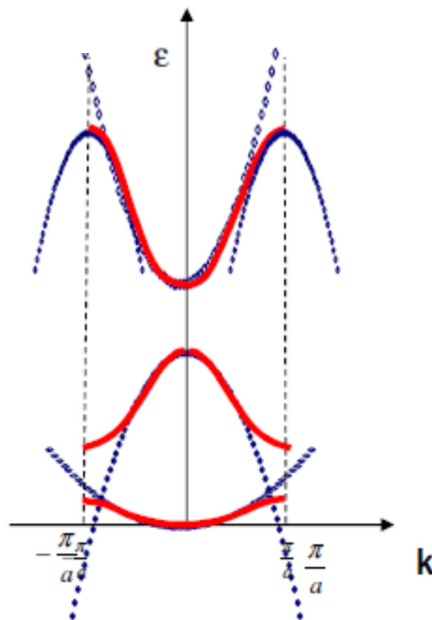
$$\rightarrow (m^*)^{-1} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 \varepsilon}{d\mathbf{k}^2}, \quad m^* \text{ massa efficace}$$

$$\frac{d^2 \varepsilon}{d\mathbf{k}^2} \equiv \frac{d^2 \varepsilon}{dk_i dk_j} \quad \text{grandezza con 9 componenti: tensore di massa efficace}$$

Significato:

$$a_i = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 \varepsilon}{dk_i dk_j} F_j \rightarrow \text{Caso generale: } \mathbf{a} \not\parallel \mathbf{F}$$

\rightarrow In principio: m^* dipendente dalla direzione; nel caso piu' semplice scalare



Rel di dispersione in approssimazione parabolica :

m^* indipendente da k

$$E_k = E(\mathbf{k}_0) + \underbrace{\frac{dE}{d\mathbf{k}}}_{=0} \Big|_{\mathbf{k}_0} \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) + \frac{1}{2} \frac{d^2E}{d\mathbf{k}^2} \Big|_{\mathbf{k}_0} (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)^2 \approx E(k_0) + \frac{\hbar^2}{2m^*} (k - k_0)^2$$

(minimo)

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\frac{d^2E}{d\mathbf{k}^2} \Big|_{\mathbf{k}_0}} \rightarrow \text{Segno di } m^* \text{ legato a concavita' } \rightarrow \pm !!$$

Massa efficace negativa: concetto difficile da maneggiare

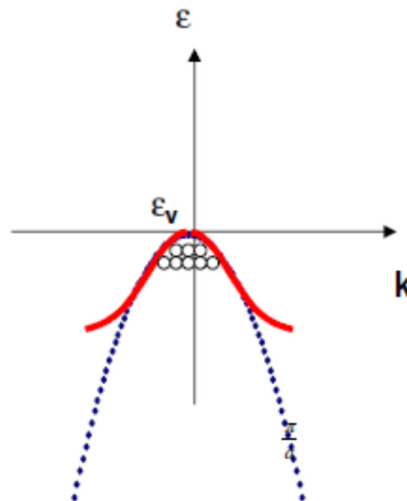
Azione di un campo esterno:

$$\mathbf{F} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) = m^* \mathbf{a} \rightarrow \mathbf{a} = \frac{q}{m^*} (\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})$$

→ Ridefiniamo:

$$\begin{cases} m^* \rightarrow |m^*| \\ q \rightarrow \pm q \text{ secondo il segno } \pm \text{ di } m^* \end{cases} \rightarrow \text{Relazione fra } \mathbf{F} \text{ e } \mathbf{a} \text{ invariata}$$

$q > 0$: lacuna = stato vuoto in una banda permessa



→ Moto portatori in un potenziale periodico:

elettroni in BC

lacune in BV

Confronto fra osservabili in modelli alla Sommerfeld e alla Bloch

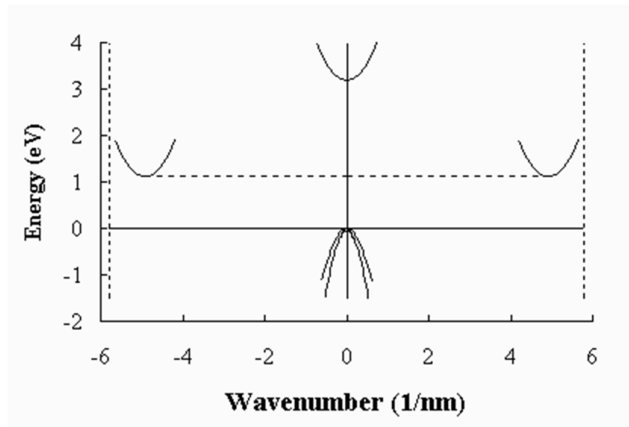
| | Sommerfeld | Bloch |
|-------------------------------|--|---|
| Numeri quantici | \underline{k} | n, \underline{k} |
| valori dei n. quantici | $k = \frac{2\pi m}{a N} \quad (1)$ | n = set infinito di interi positivi \underline{k} = tutti i valori permessi dalla (1) entro la I zona di Brillouin |
| Funzione d'onda | $\varphi_k(\underline{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\underline{k}\cdot\underline{r}}$ | $\varphi_k(\underline{r}) = u_k(\underline{r}) e^{i\underline{k}\cdot\underline{r}}$ con \underline{R} vettore di reticolo cristallino $u_k(\underline{r}) = u_k(\underline{r} + \underline{R})$ |
| Energia | $\varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ | $\varepsilon_n(\underline{k}) = \varepsilon_n(\underline{k} + \underline{G})$ con \underline{G} vettore di reticolo cristallino |
| momento | $\hbar k$ momento elettronico | $\hbar k$ momento cristallino |
| massa | $m_e = 0.911 \cdot 10^{-30} \text{ kg}$ | $m = \frac{\hbar^2}{\left(\frac{d^2\varepsilon}{dk^2}\right)}$ |
| Velocità | $\underline{v} = \frac{\hbar \underline{k}}{m}$ | $\underline{v}_g = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_n(\underline{k})}{\partial \underline{k}}$ |

Complicazioni legate alla struttura 3D del cristallo:

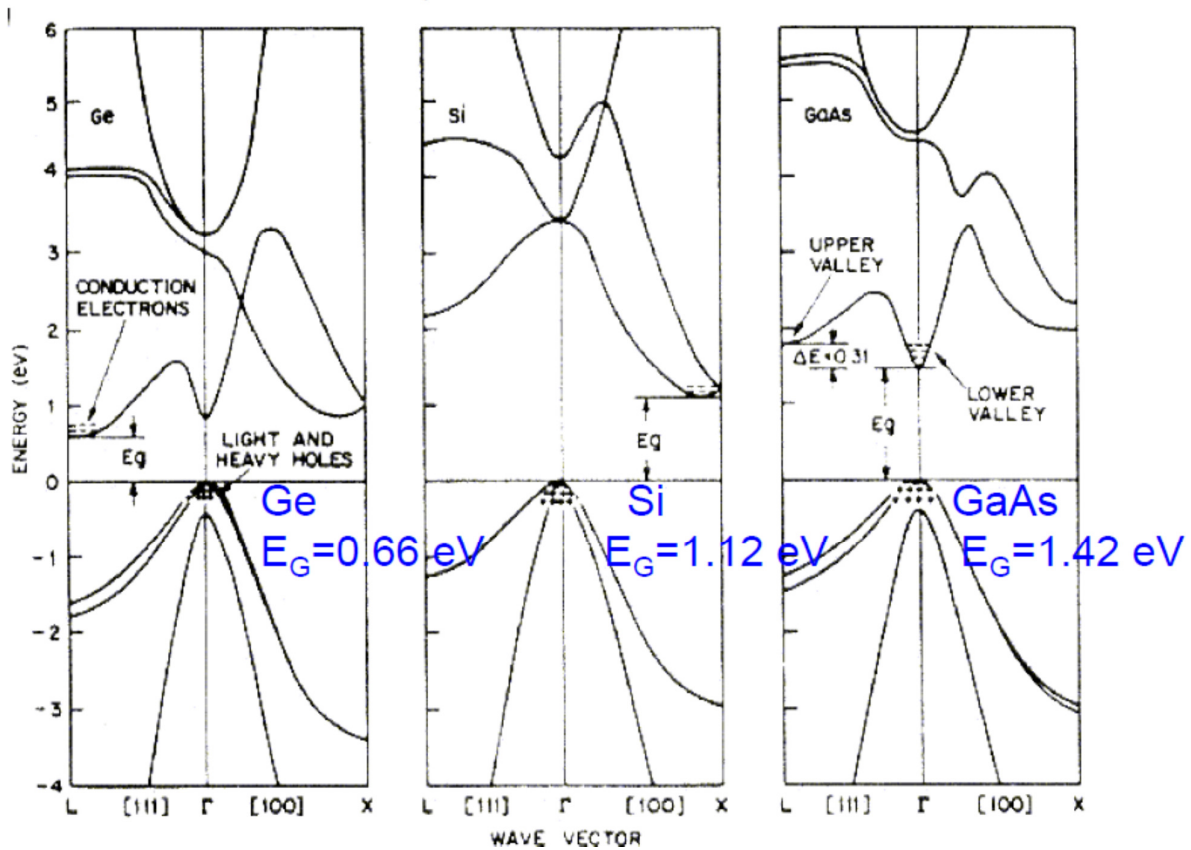
Dipendenza da direzione

Presenza di piu' di una banda di valenza

Es: Si nella direzione cristallina (1,0,0)



Ge, Si e GaAs



Massa efficace nei cristalli semiconduttori piu' usati

GaAs

Elettroni: m^* indipendente dalla direzione $\approx 0.067 m_e$

Lacune: m^* indipendente dalla direzione,
dipendente dalla banda di valenza (2 in tutto)

$$m^* \approx \begin{cases} 0.082 m_e & \text{leggere} \\ 0.45 m_e & \text{pesanti} \end{cases}$$

Ge

Elettroni: m^* dipendente dalla direzione $\begin{cases} m_l^* \approx 1.59 m_e \\ m_t^* \approx 0.089 m_e \end{cases}$

Lacune: m^* indipendente dalla direzione,
dipendente dalla banda di valenza (2 in tutto)

$$m^* \approx \begin{cases} 0.16 m_e & \text{leggere} \\ 0.48 m_e & \text{pesanti} \end{cases}$$

Si

Elettroni: m^* dipendente dalla direzione $\begin{cases} m_l^* \approx 0.98 m_e \\ m_t^* \approx 0.19 m_e \end{cases}$

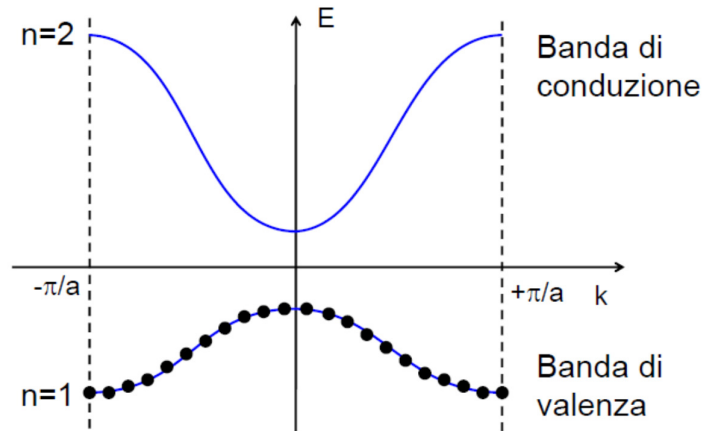
Lacune: m^* indipendente dalla direzione,
dipendente dalla banda di valenza (2 in tutto)

$$m^* \approx \begin{cases} 0.044 m_e & \text{leggere} \\ 0.28 m_e & \text{pesanti} \end{cases}$$

Dipendenza dalla direzione:

$$E(\mathbf{k}) = \hbar^2 \left(\frac{k_x^2 + k_y^2}{2m_t} + \frac{k_z^2}{2m_l} \right)$$

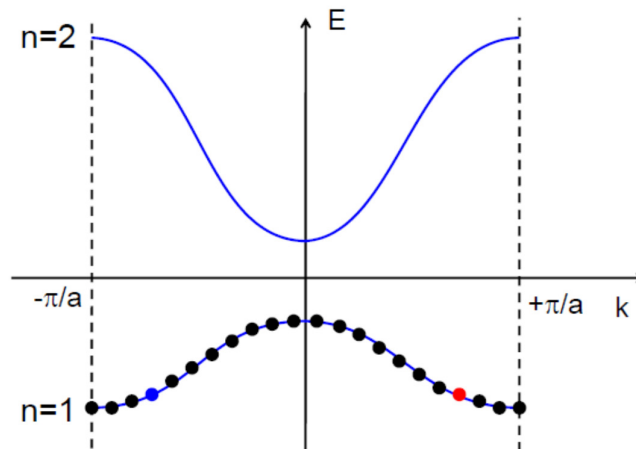
Popolazione delle bande: $T = 0 K$



$2N$ elettroni in b.valenza, 0 elettroni in b. conduzione

Isolanti & Semiconduttori

Corrente di banda piena:

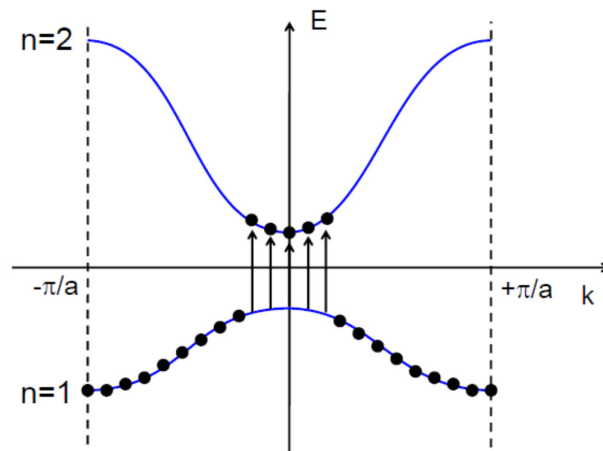


Esempio caso 1D:

$$I = jA = \rho A \sum_i v_i = -\frac{q}{L} \sum_i v_i = 0$$

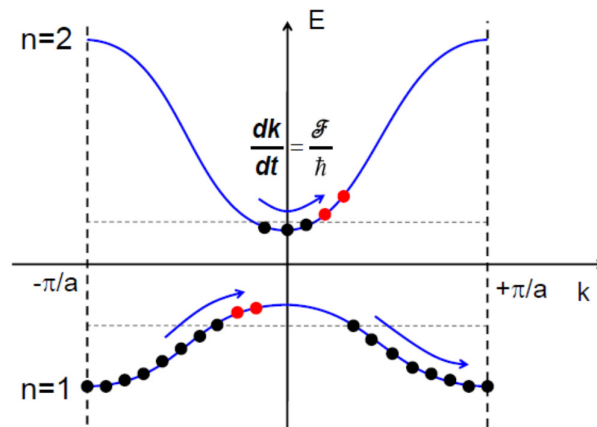
Per ogni elettrone con $+v_i$ ce n'e' un altro con $-v_i$

Popolazione delle bande: $T > 0 K$



Attivazione termica di elettroni da BV a BC

Effetto di un campo elettrico:



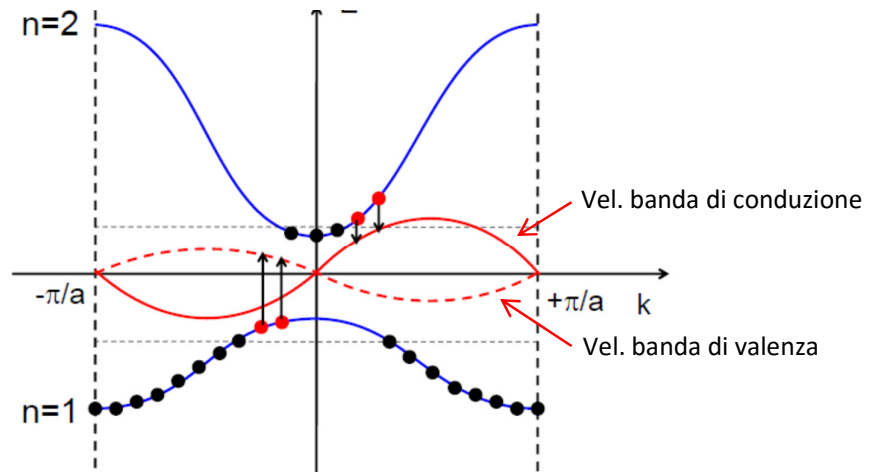
Shift verso stati a en. piu' alta

→ Perdita della compensazione delle velocita' → $I_1, I_2 \neq 0$

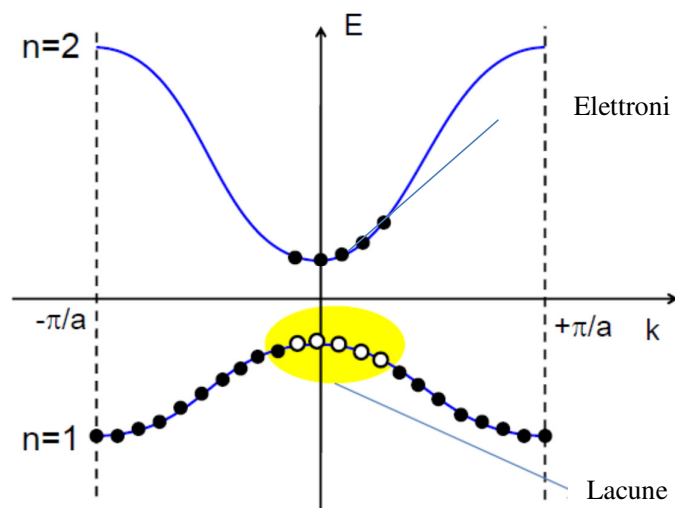
Elettroni mobili in BV:

Quelli che contribuiscono a I hanno v di segno uguale a quelli in BC

$$v = \frac{dE}{dk}$$



Lacune: quasi-particelle con carica positiva



Origine dell'idea di lacuna:

$$I_V = -\frac{q}{L} \sum_{\text{stati occupati}} v_i = +\frac{q}{L} \left(\sum_{\text{tutti gli stati}} v_i - \sum_{\text{stati occupati}} v_i \right) = +\frac{q}{L} \sum_{\text{stati vuoti}} v_i$$

Infatti: $\sum_{\text{Tutti gli stati}} v_i = 0$ banda piena

Esempi piu' casalinghi di lacune:



Movimento del 'buco' : opposto al movimento del 'pieno'

Concentrazioni di elettroni/lacune:

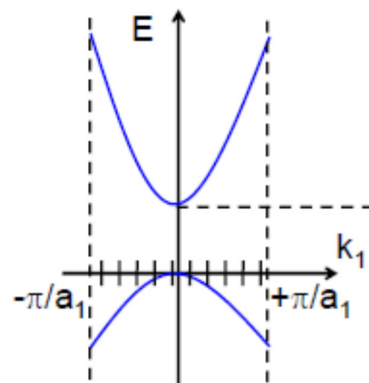
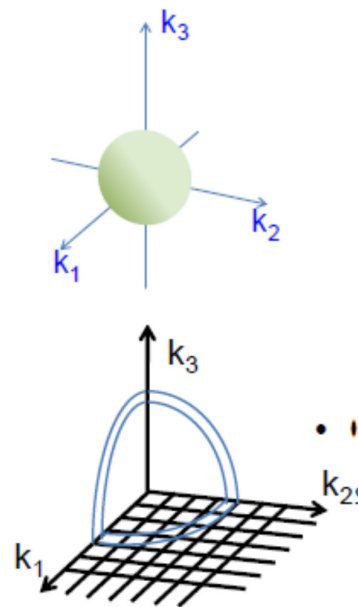
Banda di conduzione o di valenza

$$n(E) = g(E)f(E)$$

$g(E)$ densita' degli stati per intervallo unitario di energia

$f(E)$ probabilita' di occupazione di uno stato di energia E

$g(E), p(E)$ indipendenti



$$G(k)dk = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi k^2 dk \quad \text{densita' degli stati per intervallo unitario di energia}$$

$$g(k)dk = \frac{G(k)}{V} dk = \frac{k^2}{\pi^2} dk \quad \text{come sopra, per unita' di volume}$$

$$E = E_c + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m^*} \rightarrow \frac{dE}{dk} = \frac{\hbar^2 k}{m^*}$$

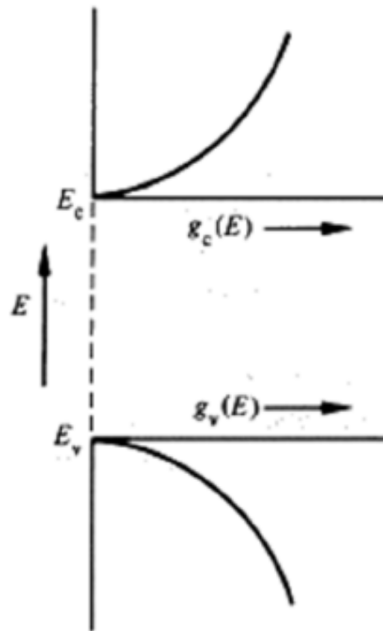
$$g(E)dE = g(k)dk \rightarrow g(E) = \frac{g(k)}{\frac{dE}{dk}} = \frac{k^2}{\pi^2} \frac{m^*}{\hbar^2 k}$$

$$k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m^*(E - E_c)} \rightarrow g(E) = \frac{k^2}{\pi^2} \frac{m^*}{\hbar^2 k} = \frac{1}{\pi^2 \hbar} \sqrt{2m^*(E - E_c)} \frac{m^*}{\hbar^2}$$

$$\rightarrow g(E) = \frac{(2m^*)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E - E_c}$$

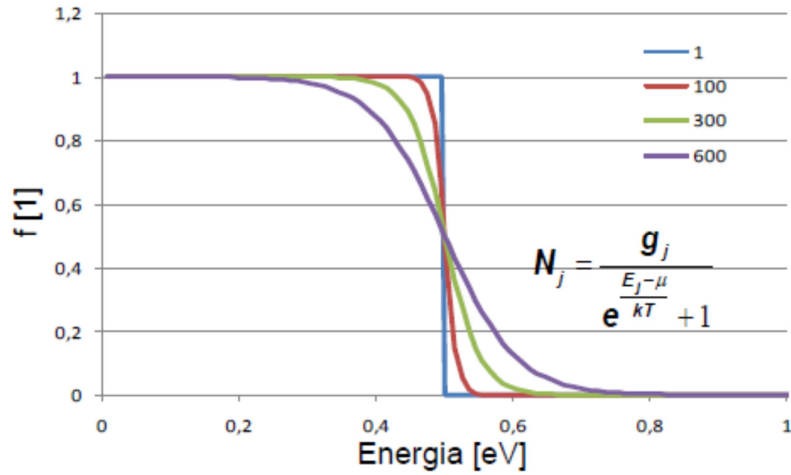
$$g_c(E) = \frac{(2m^*)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E - E_c} \quad \text{dens. stati nella banda di conduzione}$$

$$g_v(E) = \frac{(2m^*)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E_v - E} \quad \text{dens. stati nella banda di valenza}$$

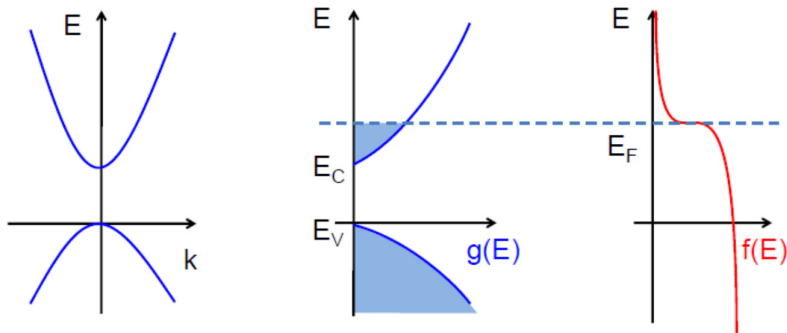


Probabilità di occupazione: Distribuzione di Fermi-Dirac

$$f(E) = \frac{g}{1 + e^{\frac{E-E_F}{kT}}}, g \text{ molteplicità, } E_F \text{ livello di Fermi}$$



Metalli



Semiconduttori/isolanti

