

Conducitivita': legata al trasporto di carica nel cristallo

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

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

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

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

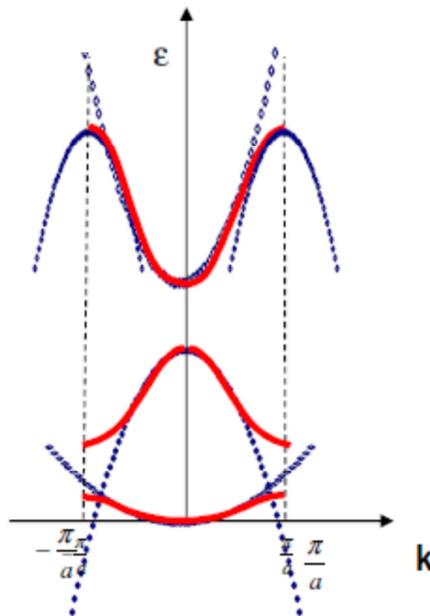
$$\rightarrow (m^*)^{-1} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 \varepsilon}{d\mathbf{k}^2}, \quad m^* \text{ massa efficace}$$

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

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; spesso = 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)

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

Massa efficace negativa: concetto difficile da maneggiare

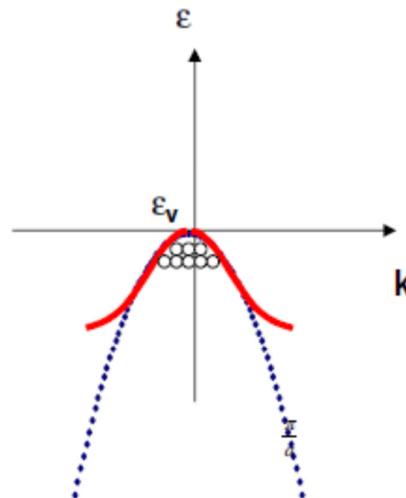
Azione di un campo esterno:

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

→ 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	$k = \frac{2\pi}{a} \frac{m}{N} \quad (1)$	n = set infinito di interi positivi \underline{k} = tutti i valori permessi dalla (1) entro la I zona di Brillouin
Funzione d'onda	$\varphi_k(r) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$	$\varphi_k(\underline{r}) = u_k(\underline{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ 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	$\underline{v} = \frac{\hbar \underline{k}}{m}$	$\underline{v}_g = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_n(\underline{k})}{\partial \underline{k}}$

Masse efficaci degli elettroni in BC

La massa efficace per il GaAs è unica per le tre direzioni di k : $m = 0.067m_e$.
Per Si e Ge si hanno due valori di massa efficace: la massa longitudinale m_l e quella trasversale m_t .

Posso scrivere perciò, per Si e Ge:

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

Si
$m_l = 0.98m_e$
$m_t = 0.19m_e$

Ge
$m_l = 1.59m_e$
$m_t = 0.089m_e$

Masse efficaci delle lacune in BV

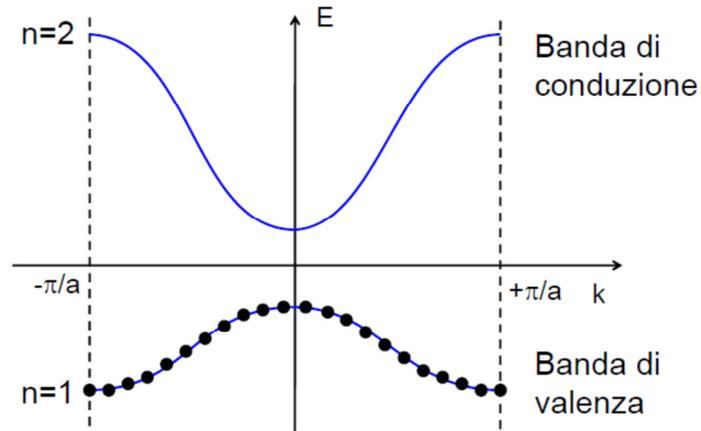
Le bande di valenza di Si, Ge, GaAs, sono centrate in $K = 0$. La massa efficace è la stessa nelle tre direzioni k_x , k_y , k_z . E la superficie a energia costante è una sfera. In tutti e tre i materiali le bande di valenza sono due, avremo quindi due masse efficaci, una pesante e l'altra leggera.

Ge
$m_{lh} = 0.16m_e$
$m_{hh} = 0.48m_e$

Si
$m_{lh} = 0.044m_e$
$m_{hh} = 0.28m_e$

GaAs
$m_{lh} = 0.082m_e$
$m_{hh} = 0.45m_e$

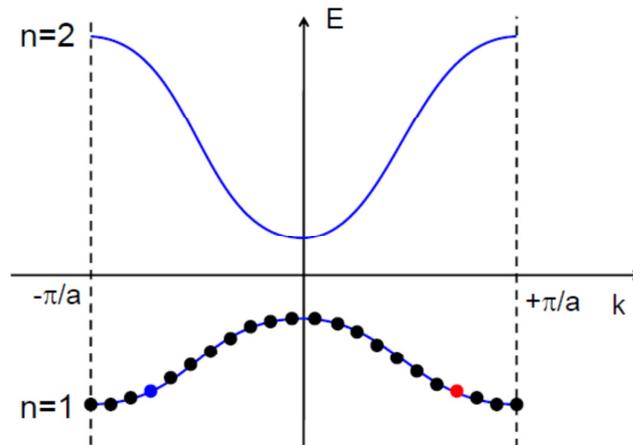
Popolamento delle bande: $T = 0$ K



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

Isolanti & Semiconduttori

Corrente di banda piena:

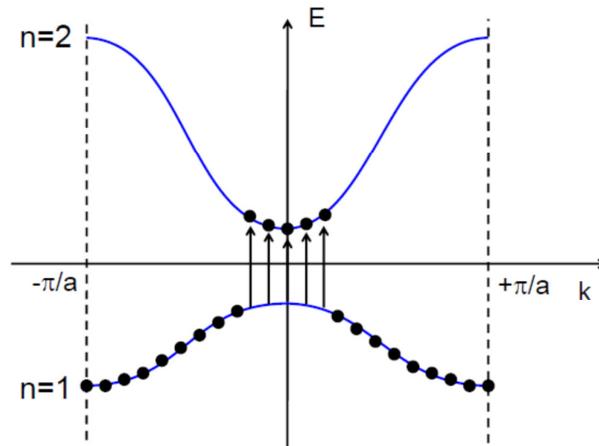


Esempio caso 1D:

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

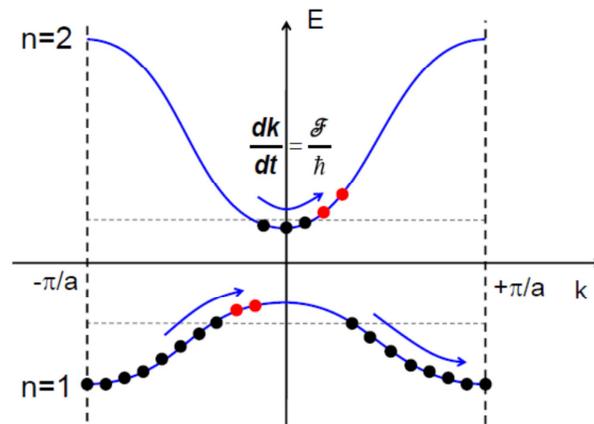
Per ogni elettrone con $+v_i$ ce n'e' un altro con $-v_i$

Popolamento delle bande: $T > 0 K$



Attivazione termica di elettroni da BV a BC

Effetto di un campo elettrico:



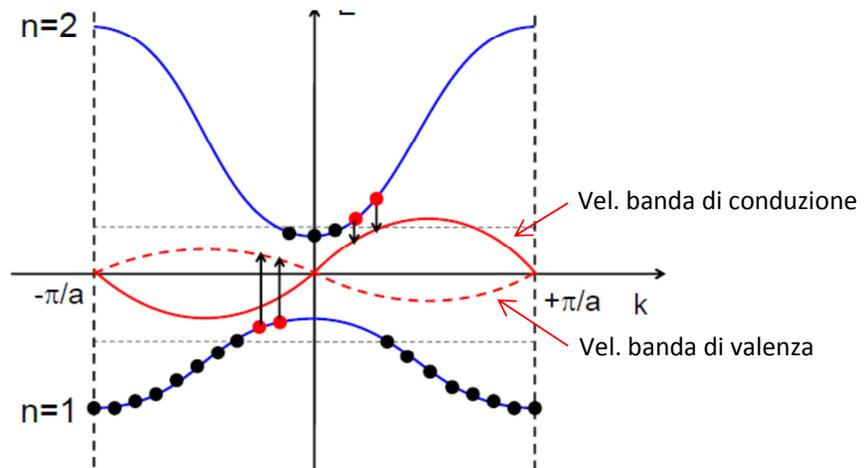
Shift verso stati a en. piu' alta

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

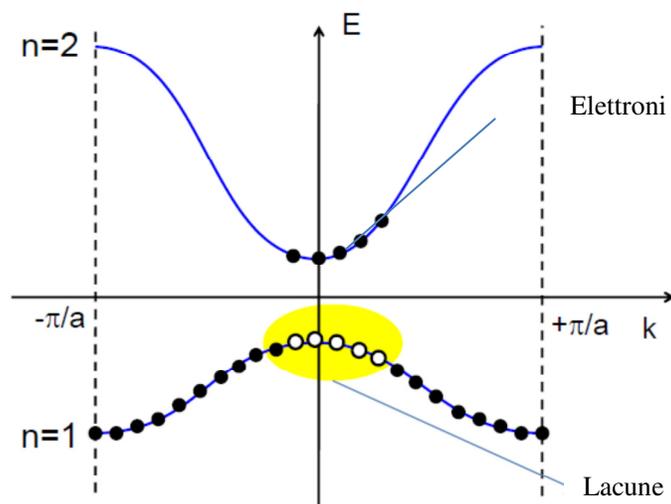
Elettroni mobili in BV:

Quelli che contribuiscono a I stessa v di 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:

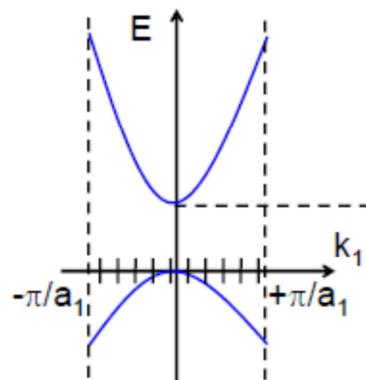
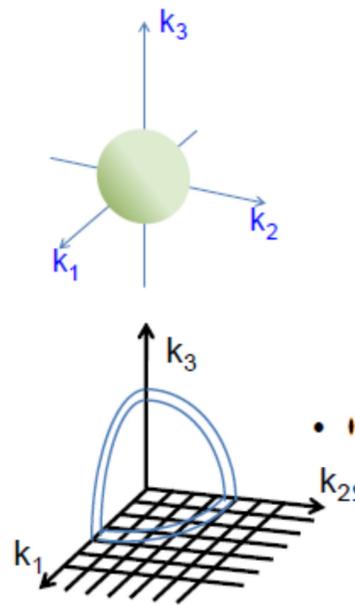
Banda di conduzione o di valenza

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

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

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

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



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

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

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

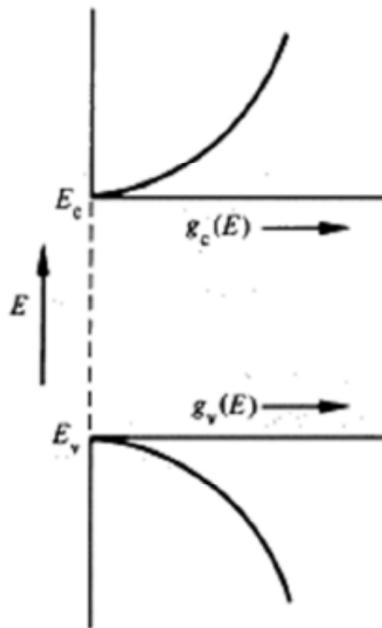
$$g(E)dE = g(k)dk \rightarrow g(E) = \frac{g(k)}{\frac{dE}{dk}} = \frac{k^2}{\pi^2} \frac{m^*}{\hbar^2 k}$$

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

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

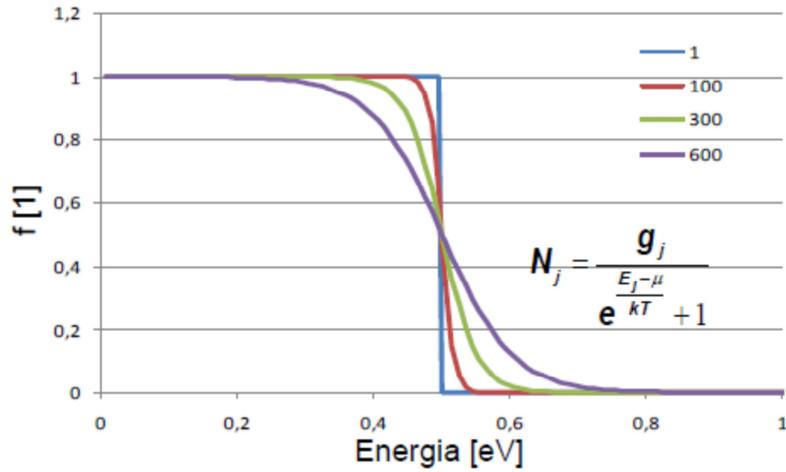
$$g_c(E) = \frac{(2m^*)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E - E_c} \quad \text{dens. stati nella banda di conduzione}$$

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

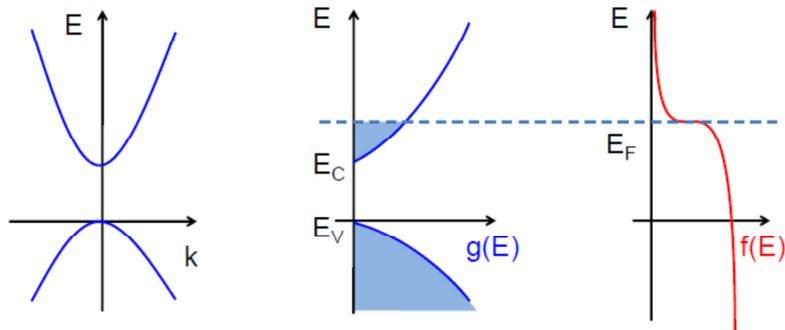


Probabilità di occupazione: Distribuzione di Fermi-Dirac

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



Metalli



Semiconduttori/isolanti

