ESERCITAZIONE 10:

Esercizio 1

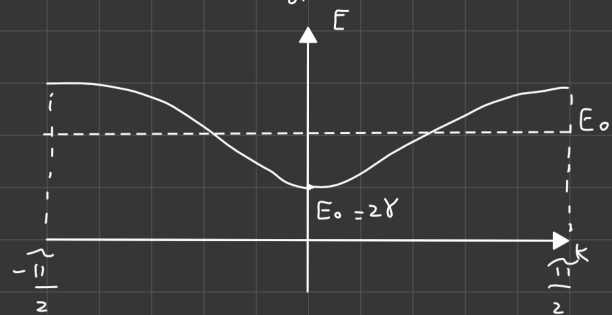
Si consideri un elettrone in un reticolo cristallino caratterizzato dalla relazione di dispersione $E(k) = E_0 - 2\gamma\cos(ka)$ (tight binding), dove $\gamma = 38\ meV$, $a = 1\ nm$.

1. Calcolare la massa efficace m^* a fondo banda
2. Applicato un campo elettrico $F = 10\frac{kV}{cm}$, si determini il moto seguito dall'elettrone, supponendo per il momento assenza di scattering. Calcolare l'ampiezza Δx e la pulsazione di Bloch ω_B. Sono apprezzabili tali oscillazioni?
3. Supponendo adesso che il moto dell'elettrone sia soggetto a scattering (tempo di rilassamento $t_m = 200\ fs$), si verifichi che per lo stesso campo F non si hanno oscillazioni di Bloch.
4. Si calcoli la mobilità elettronica.

1)

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\frac{\partial^2 E}{\partial k^2}} = \frac{\hbar^2}{2\gamma a^2\cos(ka)}\bigg|_{k=0}$$

$$\frac{\partial E}{\partial k} = 2\gamma a \sin(ka) \qquad \frac{\partial^2 E}{\partial k^2} = 2\gamma a^2 \cos(ka)$$



di $k=0$

$m^*(0)$

$$m^*(0) = \frac{\hbar^2}{2\gamma a^2} \cong 1{,}004\ m_e$$

2) $F = 10\ kV/cm$

$x(t)$

$\Delta x, \omega_0$

relazione dinamica semiclassica

$$\hbar\frac{\partial k}{\partial t} = qF$$

$E = \hbar\omega$

$$F = \frac{1}{q}\frac{\partial E}{\partial x} \rightarrow F\partial x = \frac{1}{q}\partial E$$

$$F\frac{\partial x}{\partial t} = \frac{1}{q}\frac{\partial E}{\partial t} \rightarrow F v_g = \frac{1}{q}\frac{\partial E}{\partial k}\cdot\frac{\partial k}{\partial t}$$

forza

$$\vec{F} = m\cdot a = m\frac{\partial v}{\partial t} = \frac{\partial p}{\partial t}$$

accelerazione

$$qF = \frac{\partial p}{\partial t} = \hbar\frac{\partial k}{\partial t}$$

$$\int_{k(0)}^{k(t)} \hbar\, dk = \int_0^t qF(\tau)\, d\tau$$

$$\underbrace{\hbar\left(k(t)-k(0)\right)}_{\Delta k(t)} = qFt \rightarrow \text{nel nostro caso} \rightarrow k(t) = \frac{qF}{\hbar}t$$

$$v_g = \frac{dx}{dt} \hookrightarrow x(t)-x(0) = \int_0^t v_g(t)\,dt$$

$$v_g = \frac{1}{\hbar}\frac{dE}{dk} = \frac{1}{\hbar}\cdot 2\gamma a \sin(ka) \longrightarrow v_g(t) = \frac{1}{\hbar}\cdot 2\gamma a \sin(k(t)a)$$

$$= \boxed{\frac{2\gamma a}{\hbar}\sin\left(\frac{qF}{\hbar}at\right) = v_g(t)}$$

$$x(t)-x(0) = \int_0^t \frac{2\gamma a}{\hbar}\sin\left(\frac{qFa}{\hbar}t\right)$$

$$= \boxed{\frac{2\gamma}{qF}\left[1-\cos\left(\frac{qFa}{\hbar}t\right)\right]}$$

pulsazione di bloch w_c

ampiezza dell'oscillazione Δx

$$\Delta x = \frac{2\gamma}{qF} = 76\ \text{nm} \qquad w_B = 1,52\cdot 10^{15}\ \text{rad/s}$$

queste oscillazioni sono apprezzabili? NO! l'ampiezza dell'oscillazione è di 76 nm mentre il passo reticolare è di 1 nm

devo quindi considerare fenomeni di scattering

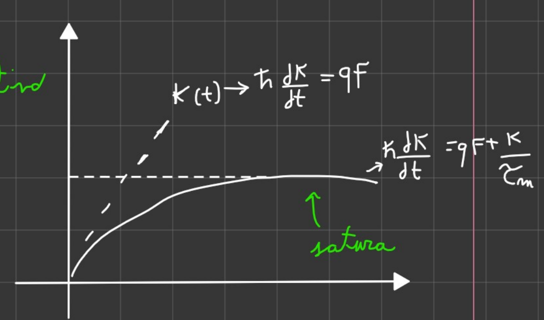
3) ora usiamo il modello di Drude

tempo di rilassamento del momento

T = 200 fs

$$\hbar\frac{dk}{dt} = qF + \frac{k}{\tau_m}$$

termine correttivo



ci poniamo a un tempo tale per cui il k si è stabilizzato al valore stazionario

$$0 = \frac{qF}{\hbar} + \frac{k}{\tau_m} \rightarrow k = \frac{-qF}{\hbar}\tau_m = 3 \cdot 10^8 \, m^{-1}$$ implicitamente radianti a m^{-1}

$$k_{FZB} = \frac{\pi}{a} = 3{,}14 \cdot 10^{-9} \, m^{-1}$$

$$T = \frac{2\pi}{\omega_B} = 4{,}1 \; ps$$

l'elettrone ogni 200 fs subisce fenomeni di scattering

non può quindi rimanere indisturbato per questo periodo

4) vogliamo ora calcolare la mobilità elettronica $\rightarrow \mu$

k stazionario

$$v_e = \frac{p}{m^*} = \frac{\hbar \bar{k}}{m^*} = \frac{\cancel{\hbar}}{m^*} \cdot \frac{qF}{\cancel{\hbar}}\tau_m = \frac{q\tau_m}{m^*} F$$

$\frac{q\tau_m}{m^*} \rightarrow \mu$

mobilità elettronica

definisce quanto il nostro materiale è viscoso da un punto di vista elettronico

$$\mu = \frac{q\tau_m}{m^*} = 350 \; \frac{cm^2}{V \cdot s}$$

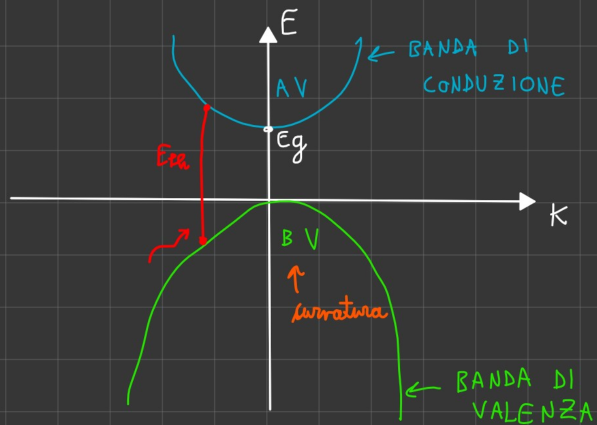
esercizio 2:

Esercizio 2

Si consideri un materiale con fondo della banda di conduzione e di valenza descritti dalle relazioni $E_C = E_g + Bk^2$ ed $E_V = -Ak^2$, dove $A = 10^{-19}\, eV \cdot m^2$, $B = 5 \cdot A$, $E_g = 1\, eV$ e $a = 5$ Å. Il materiale viene irraggiato con una sorgente luminosa avente $\lambda = 620\, nm$.

1. Determinare k con cui l'elettrone è promosso in banda di conduzione.
2. Determinare l'energia cinetica della lacuna e dell'elettrone coinvolti nel processo e la velocità di gruppo associata all'elettrone.
3. Assumendo che l'elettrone interagisca con un solo fonone, calcolare ΔE e Δp affinché si sposti sul fondo della banda.
4. Trascurando i fenomeni di scattering, calcolare la variazione di energia per elettroni e lacune e la velocità a seguito dell'applicazione di un campo elettrico $F = 350 \frac{kV}{cm}$ dopo $\Delta t = 2\, fs$.

1) K   BV $\rightarrow$ BC



dato che il fondo della banda di conduzione e l'apice della banda di valenza sono allineati, si dice che il materiale è a gap diretto
(come l'arseniuro di gallio)
(i materiali del gruppo 3-5)

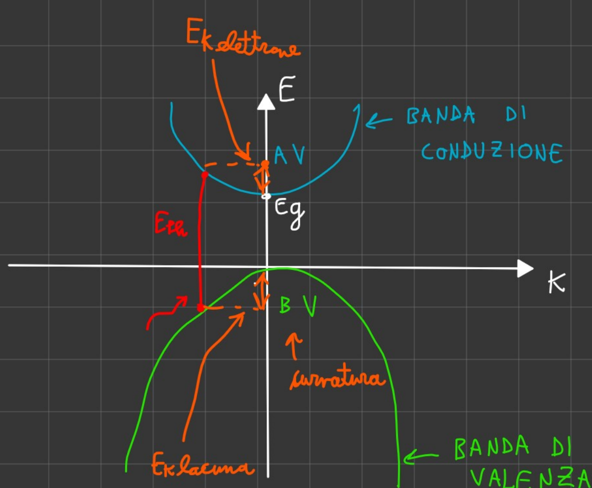
B > A, curva di valenza con curvatura maggiore della curva di conduzione

$$E_c(K) - E_v(K) = E_g + BK^2 + AK^2 = E_g + (B+A)K^2$$

$$\bar{K}: \quad E_{ph} = \frac{hc}{\lambda} = E_g + (B+A)\bar{K}^2$$

$$\frac{hc}{\lambda} = E_g + 6A\bar{K}^2 \longrightarrow K = \sqrt{\frac{1}{6A}\left(\frac{hc}{\lambda} - E_g\right)} = \pm 1{,}29 \cdot 10^9 \, m^{-1} = \pm 0{,}21 \frac{\pi}{a}$$

2)



$$E_{ke^-} = \cancel{E_g} + B \cdot \bar{K}^2 - (\cancel{E_g} + B \cdot 0) = B\bar{K}^2 = 832 \, meV$$

$$E_{kl} = A\bar{K}^2 = 166 \, meV$$

2) $v_g = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial E}{\partial k} = \frac{1}{\hbar} \cdot 2B\bar{K} = 1{,}96 \cdot 10^6 \, m/s$

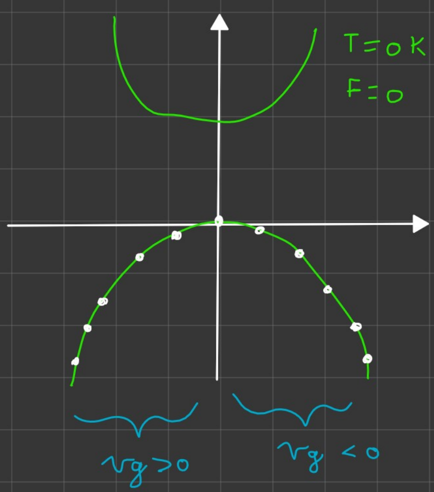
fonone = è una quasi-particella che descrive un quanto di vibrazione del reticolo

3) $\Delta E, \Delta P$ $\qquad \Delta E = 832 \, meV$

$$\Delta P = \hbar(\bar{k} - 0) = \hbar\bar{k} = 1{,}36 \cdot 10^{-25} \ kg\ m/s$$

sono le proprietà del fonone emesso per via del rilassamento dalla banda di conduzione a quella di valenza

4) $F = 350 \ \frac{kV}{\mu m}$ $\qquad \Delta t = 2\,fs$



non ho un contributo netto di corrente

Consideriamo ora cosa succede quando applichiamo un campo a questo materiale

considerriamo queste condizioni:

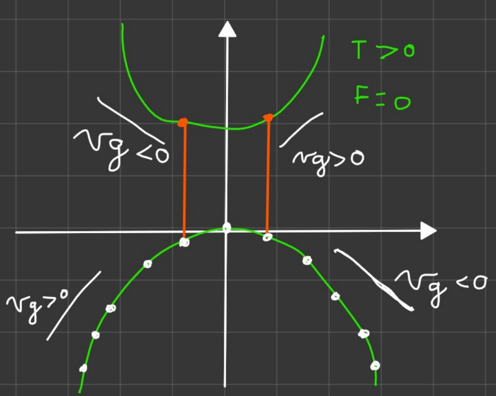
$T = 0\,K$

$F = 0$

- gli elettroni sono ora tutti sulla banda di valenza

Nel momento in cui, mantenuta l'assenza di campo, si aumenta la temperatura a $T > 0$:

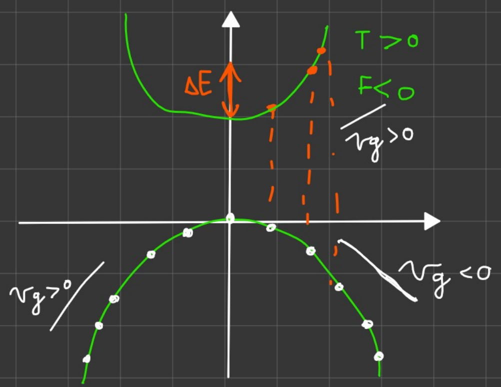
- Alcuni elettroni saranno promossi nella banda di conduzione



non ho ancora un contributo netto di corrente

Nel momento in cui vado ad applicare un campo, le cose cambiano:

Il K stazionario si sposta ora dall'equilibrio



I due flussi (uno positivo e uno negativo) non si equivalgono più. Ho quindi un flusso netto di corrente

La variazione del momento indotta dalla presenza del campo fa in modo che l'elettrone acquisisca energia.

Quando applico il campo, quanto valgono l'energia e la velocità di gruppo?

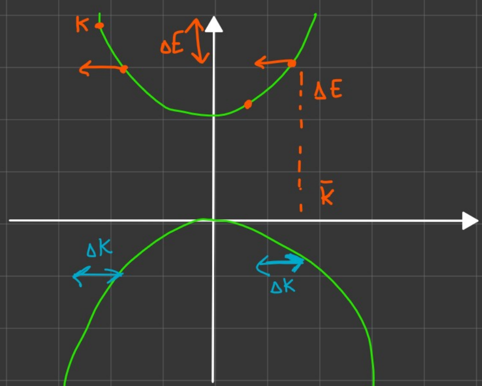
non uso l'integrale poiché non ho dipendenza dal tempo.

$$\hbar \frac{dK}{dt} = qF \longrightarrow \boxed{\Delta K = \frac{qF}{h} \cdot \Delta t}$$

$$\Delta K = -1,06 \cdot 10^{8} \, m^{-1}$$

gli elettroni hanno carica negativa → abbiamo un campo negativo

$$\bar{K} = 1,29 \cdot 10^{9} \, m^{-1}$$



nel caso dei K positivi

$$\Delta E_c = B \cdot \bar{K}_{fin}^2 - B K_{in}^2 =$$

$$\Delta E_c = B(K_{in} + \Delta K)^2 - B K_{in}^2 = -131 \text{ meV} \quad \checkmark$$

$K = \dots$

le lacune non hanno una carica fisica

$$\cancel{\Delta E_l = A K_{fin}^2 - A K_{in}^2 = -26,2 \text{ meV}} \quad \checkmark$$

lo spostamento delle lacune va come quello dell'elettrone, poiché il modello di Drude non si applica alle lacune

Se l'elettrone si sposta di un certo ΔK, la lacuna lo segue, non va in verso opposto

$$v_g = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial E_c}{\partial K} = \frac{1}{\hbar}\cdot 2B\bar{K}_{fin} = 1{,}8\cdot 10^{6}\,\frac{m}{s}$$

$$v_{g,e} = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial E_{ce}}{\partial K} = \frac{1}{\hbar}\left(-2A\bar{K}_{fin}\right) = -4{,}2\cdot 10^{5}\,\frac{m}{s}$$