ESERCITAZIONE 9:

esercizio 1

Esercitazione 9 (21/04/2022)

Esercizio 1

Si consideri la relazione di dispersione $E(k) = E_0 + \frac{E_0}{2}\cos(2ka)$, con $E_0 = 2\ eV$ e $a = 0.5\ nm$.
Ponendosi nella prima zona di Brillouin, calcolare:

1) • per quali intervalli di k la massa efficace m^* è positiva,
2) • m^* nei punti di massima e minima energia,
3) • per quali valori di k la massa efficace è infinita.

1) Nella prima zona di Brillouin abbiamo i k che risiedono fra $-\frac{\pi}{a}$ e $\frac{\pi}{a}$

$$k \in \left[-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\right]$$

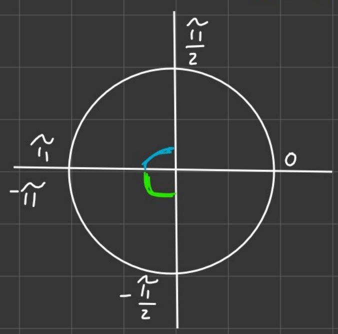
$$\boxed{m^*(k) = \frac{\hbar^2}{\frac{\partial^2 E}{\partial k^2}\Big|_0}}$$

$$\frac{\partial E}{\partial k} = -2a\frac{E_0}{2}\sin(2ka) = -a E_0 \sin(2ka)$$

$$\frac{\partial^2 E}{\partial k^2} = -2a^* E_0 \cos(2ka)$$

$$m^*(k) = -\frac{\hbar^2}{2a^2 E_0 \cos(2ka)}$$

quando il coseno assume valori negativi?



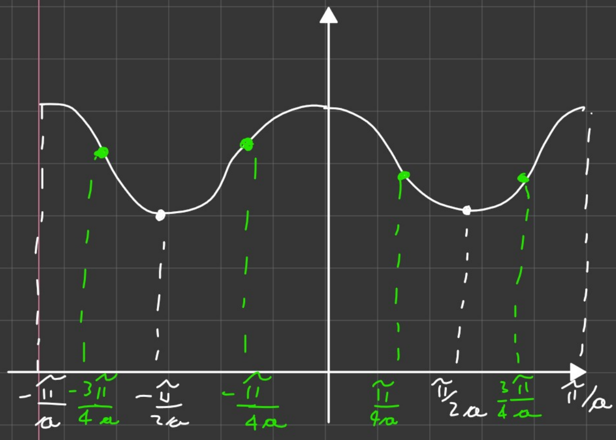
1) $\frac{\pi}{4a} < k < \frac{\pi}{2a}$

2) $-\frac{\pi}{2a} < k < -\frac{\pi}{4a}$

$\cos(2k/a)$, $k = 0 \longrightarrow 0$

$\cos(2ka)$, $k = \pm\frac{\pi}{2a} \longrightarrow -1$ $\qquad 2ka = \pm(2m)\pi$

$\cos(2ka)$, $k \pm \frac{\pi}{a} \longrightarrow 0$



$$2ka = \pm (2m)\pi \qquad n = 0, 1, \dots$$

$$m = 0 \rightarrow k = 0$$

$$m = 1 \rightarrow 2ka = \pm 2\pi \rightarrow k = \pm \pi/a$$

$$m = 2 \rightarrow 2ka = \pm 4\pi \rightarrow k = \pm 2\pi/a \rightarrow \text{fuori da B.L.}$$

per i minimi:

$$w = 0 \rightarrow 2ka = \pm \pi \rightarrow k = \pm \frac{\pi}{2a}$$

$$w = 1 \rightarrow 2ka = \pm \pi \rightarrow k = \pm \frac{3}{2} ka$$ → fuori dalla 1ª zona di B.L.

2) bisogna quindi calcolare la massa efficace nei punti trovati

$$\boxed{m^* = \frac{h^2}{2a^2 E_0 \cos(2ka)}}$$

← formula per calcolare la massa dell'elettrone

- $m^*(k = 0, k = \pm\pi/a) = \dfrac{-\hbar^2}{2a^2 E_0} = 0{,}076 \cdot m_e$
- $m^*\left(k = \pm\dfrac{\pi}{2a}\right) = \dfrac{-\hbar^2}{2a^2 E_0} = 0{,}076 \cdot m_e$

Il segno della massa va con la derivata seconda della funzione nel grafico, ergo con la curvatura:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} > 0 \qquad \frac{\partial^2}{\partial x^2} < 0$$

3) quando la massa efficace dell'elettrone diventa infinita?

voglio un multiplo dispari di $\frac{\pi}{2}$

$$\cos(2ka) = 0 \qquad 2ka = \pm(2n+1)\cdot\frac{\pi}{2} \qquad n = 0, 1, 2, 3 \dots$$

$$n = 0 \rightarrow 2ka = \pm\frac{\pi}{2} \rightarrow k = \pm\frac{\pi}{4a} \quad ✓$$

$$n = 1 \rightarrow 2ka = \pm\frac{3}{2}\pi \rightarrow k = \pm\frac{3}{4}\frac{\pi}{a} \quad ✓$$

$$n = 2 \rightarrow 2ka = \pm\frac{5}{2}\pi \rightarrow k = \pm\frac{5}{4}\frac{\pi}{a}$$ → fuori dalla zona di B.L.

Esercizio 2:

Esercizio 2

Un elettrone in un cristallo è descritto da un'autofunzione $\psi_k(x)$ con $k = 3 \cdot 10^9\ m^{-1}$. Sapendo che sono necessari 6 passi reticolari affinché l'autofunzione $\psi_k(x)$ ritorni in fase, calcolare il passo reticolare a. Tracciare inoltre il profilo della parte reale della funzione inviluppo e il profilo della parte reale dell'autofunzione su 12 passi reticolari, sapendo che la funzione di Bloch è di tipo pari con un solo massimo in corrispondenza dell'atomo.

1) $\boxed{\Delta\phi = k \cdot d}$

$d = 6 \cdot a \rightarrow \Delta\phi = 2\pi$

$1\ \mathring{A} = 10^{-10}\ m$

$2\pi = k \cdot 6a \rightarrow a = \frac{\pi}{3} = 0{,}35\ nm = \underline{3{,}5\ \mathring{A}}$ ✓

2) $\Psi_K(x) = e^{iKx}\, u_k(x)$

e^{iKx} → onda piana

$u_k(x)$ → stessa periodicità del cristallo