Elettronica dello Stato Solido
Esercitazione di Laboratorio 3: Teoria a bande

Daniele Ielmini

DEI – Politecnico di Milano

ielmini@elet.polimi.it

Outline

- Reticoli di buche di potenziale

- Modello di Kronig-Penney

Outline

- Reticoli di buche di potenziale

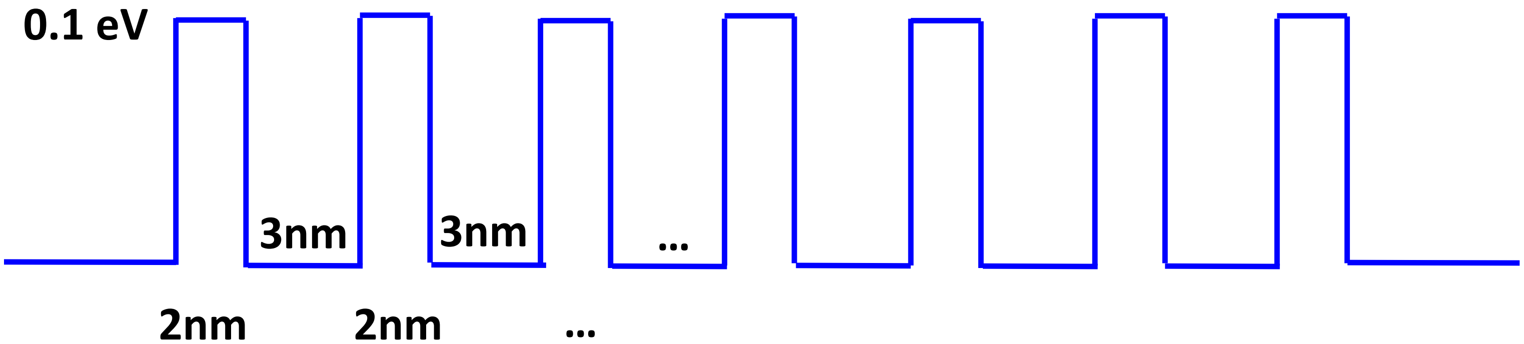
- Modello di Kronig-Penney

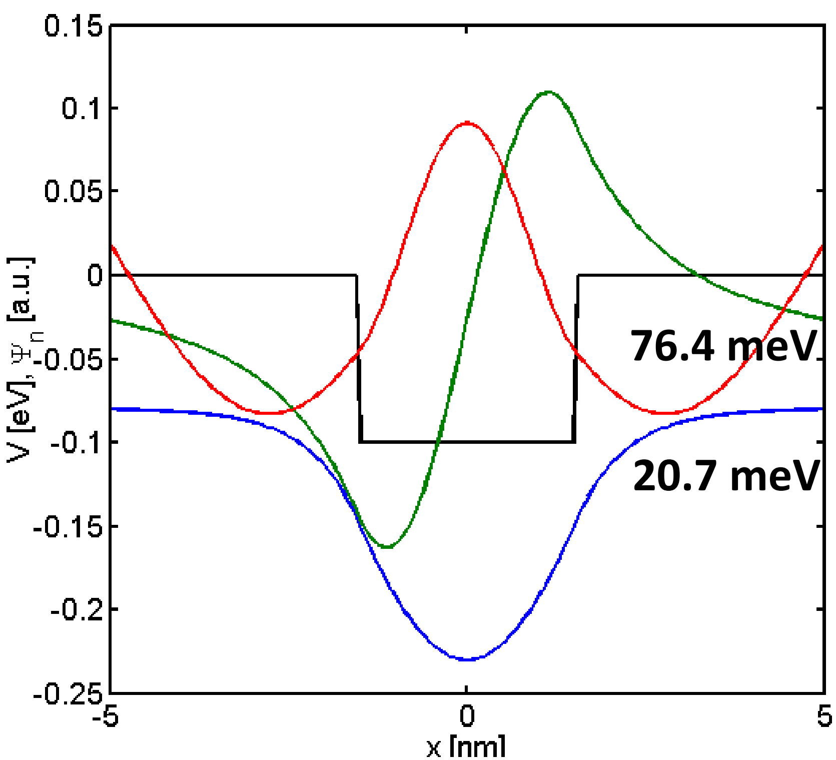
Esercizio 1 – Reticolo di sei buche

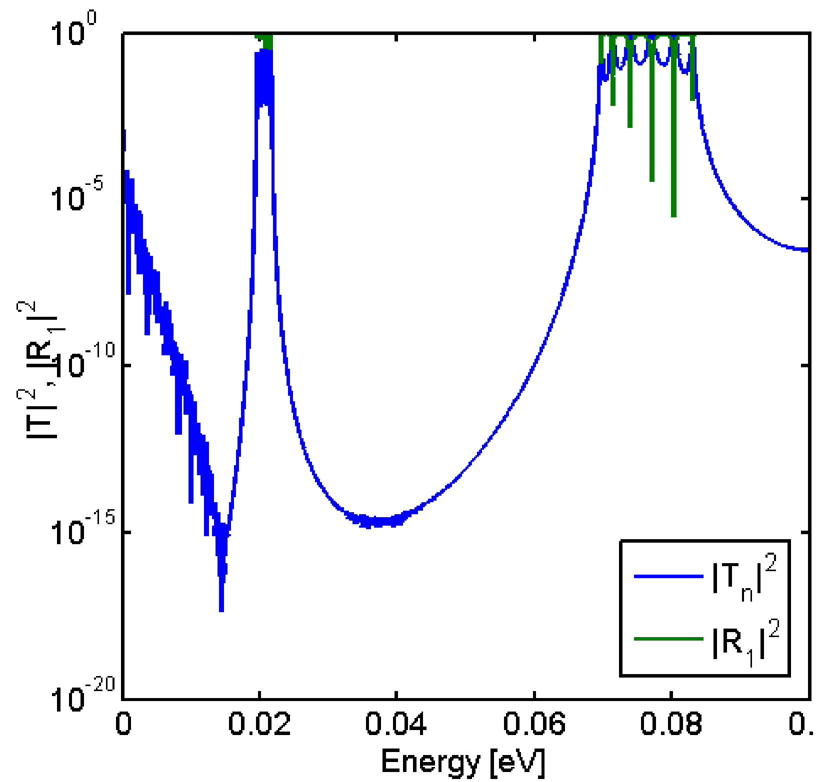
Si consideri lo script ***tm_wb.m***.

1. Studiare la trasmissione di un reticolo formato da sette barriere e sei buche periodiche
2. Confrontare le risonanze con la posizione degli autovalori di una singola buca con ***es.m***
3. Discutere la posizione delle risonanze per E > V (altezza di barriera), collegando il risultato alla teoria del weak binding.

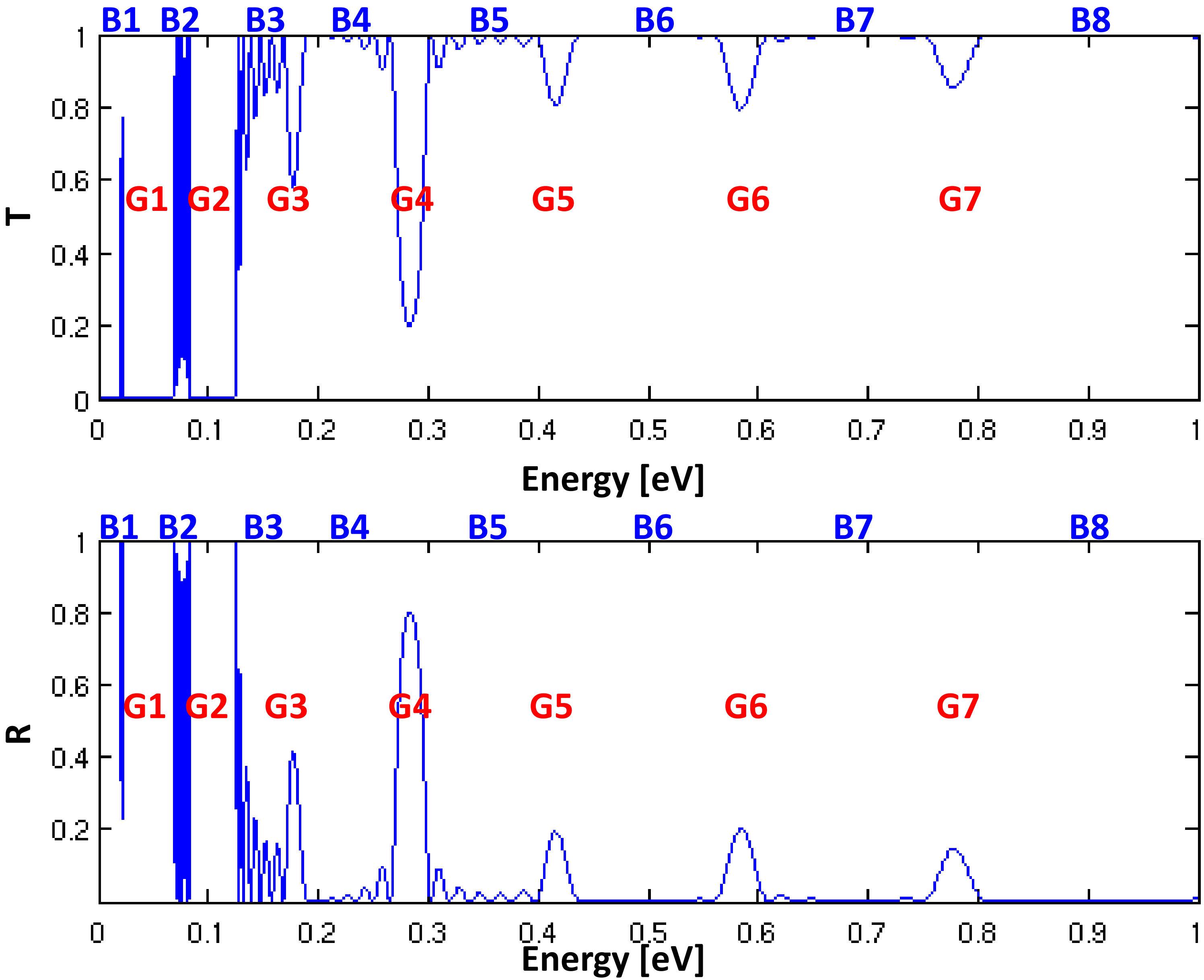
Risultati


0.1 eV
3nm
3nm
...
2nm
2nm
...


0.15
0.1
0.05
0
-0.05
-0.1
-0.15
-0.2
-0.25
-5
0
5
x [nm]
V [eV], Ψn [a.u.]
76.4 meV
20.7 meV


10^0
10^-5
10^-10
10^-15
10^-20
0
0.02
0.04
0.06
0.08
0.1
Energy [eV]
|T|^2, |R1|^2
|Tn|^2
|R1|^2

Risultati



B1 B2 B3 B4 B5 B6 B7 B8
G1 G2 G3 G4 G5 G6 G7
T
1
0.8
0.6
0.4
0.2
0
0 0.1 0.2 0.3 0.4 0.5 0.6 0.7 0.8 0.9 1
Energy [eV]
B1 B2 B3 B4 B5 B6 B7 B8
G1 G2 G3 G4 G5 G6 G7
R
1
0.8
0.6
0.4
0.2
0 0.1 0.2 0.3 0.4 0.5 0.6 0.7 0.8 0.9 1
Energy [eV]

Risultati

- Funzione d'onda in B2 (E=0.077 eV)
- Funzione d'onda in G4 (E=0.2834 eV)
- Funzione d'onda in B6 (E=0.5 eV)

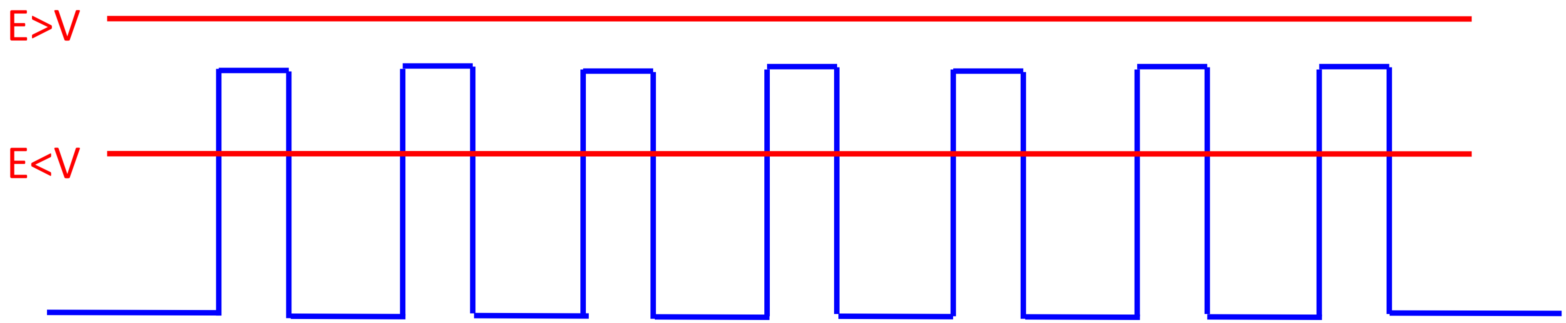
Outline

- Reticoli di buche di potenziale

- <u>Modello di Kronig-Penney</u>

Modello di Kronig-Penney

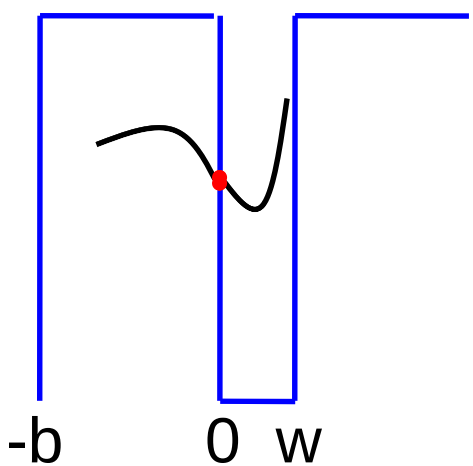
- Obiettivo: risolvere l'equazione di Schrödinger per un potenziale periodico → cristallo monodimensionale



Autofunzioni

$$\psi_w(x) = A_w \sin \alpha x + B_w \cos \alpha x$$
$$\psi_b(x) = A_b \sin \beta x + B_b \cos \beta x$$

- Nota: quando β = immaginario, le funzioni diventano iperboliche
- Condizioni al contorno:

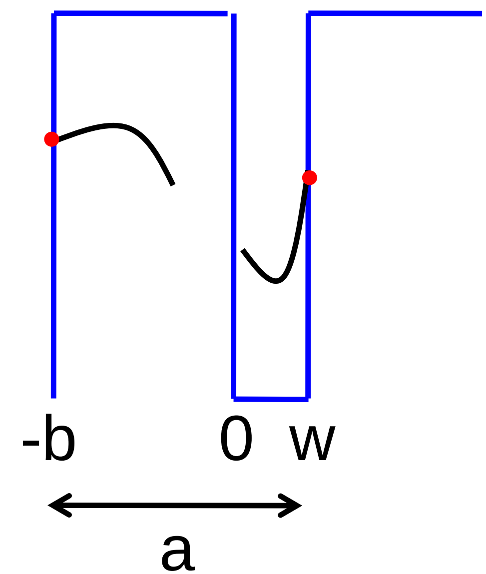


$$\begin{cases} \psi_b(0) = \psi_w(0) \\ \left.\dfrac{d\psi_b}{dx}\right|_0 = \left.\dfrac{d\psi_w}{dx}\right|_0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} B_b = B_w \\ \beta A_b = \alpha A_w \end{cases}$$

Condizioni di periodicità

- Dal teorema di Bloch, imponiamo:

$$\begin{cases} \psi_w(w) = \psi_b(-b)e^{ik(w+b)} \\ \left.\dfrac{d\psi_w}{dx}\right|_w = \left.\dfrac{d\psi_b}{dx}\right|_{-b} e^{ik(w+b)} \end{cases}$$



- Definiamo a = w+b = passo reticolare

$$\begin{cases} A_w \sin\alpha w + B_w \cos\alpha w = \left(-A_b \sin\beta b + B_b \cos\beta b\right)e^{ika} \\ \alpha A_w \cos\alpha w - \alpha B_w \sin\alpha w = \left(\beta A_b \cos\beta b + \beta B_b \sin\beta b\right)e^{ika} \end{cases}$$

Sistema caratteristico

$$
\begin{array}{l} \text{CC} \\ \\ \text{CP} \end{array}
\begin{cases}
\boldsymbol{B_b} = \boldsymbol{B_w} \\
\beta \boldsymbol{A_b} = \alpha \boldsymbol{A_w} \\
\boldsymbol{A_w} \sin \alpha \boldsymbol{w} + \boldsymbol{B_w} \cos \alpha \boldsymbol{w} = \left(-\boldsymbol{A_b} \sin \beta \boldsymbol{b} + \boldsymbol{B_b} \cos \beta \boldsymbol{b} \right) \boldsymbol{e}^{\boldsymbol{ika}} \\
\alpha \boldsymbol{A_w} \cos \alpha \boldsymbol{w} - \alpha \boldsymbol{B_w} \sin \alpha \boldsymbol{w} = \left(\beta \boldsymbol{A_b} \cos \beta \boldsymbol{b} + \beta \boldsymbol{B_b} \sin \beta \boldsymbol{b} \right) \boldsymbol{e}^{\boldsymbol{ika}}
\end{cases}
$$

- Sostituendo le condizioni al contorno alle condizioni di periodicità, si ottiene:

$$
\begin{cases}
\boldsymbol{A_w} \left(\beta \sin \alpha \boldsymbol{w} + \alpha \boldsymbol{e}^{\boldsymbol{ika}} \sin \beta \boldsymbol{b} \right) + \boldsymbol{B_w} \left(\beta \cos \alpha \boldsymbol{w} - \beta \boldsymbol{e}^{\boldsymbol{ika}} \cos \beta \boldsymbol{b} \right) = 0 \\
\boldsymbol{A_w} \left(\alpha \cos \alpha \boldsymbol{w} - \alpha \boldsymbol{e}^{\boldsymbol{ika}} \cos \beta \boldsymbol{b} \right) + \boldsymbol{B_w} \left(-\alpha \sin \alpha \boldsymbol{w} - \beta \boldsymbol{e}^{\boldsymbol{ika}} \sin \beta \boldsymbol{b} \right) = 0
\end{cases}
$$

- Si calcolano gli autovalori annullando il determinante, per ottenere:

$$
\cos \boldsymbol{ka} = \cos \alpha \boldsymbol{w} \cos \beta \boldsymbol{b} - \frac{\alpha^2 + \beta^2}{2\alpha\beta} \sin \alpha \boldsymbol{w} \sin \beta \boldsymbol{b}
$$

Soluzione del sistema

- Definiamo ora: $\alpha_0 = \frac{\sqrt{2\boldsymbol{m}\boldsymbol{V}_0}}{\hbar} \qquad \eta = \frac{\boldsymbol{E}}{\boldsymbol{V}_0}$

$$\alpha = \alpha_0\sqrt{\eta}$$

in modo da avere:

$$\beta_+ = \alpha_0\sqrt{\eta - 1}$$

$$\beta_- = \alpha_0\sqrt{1 - \eta}$$

- E sostituendo si ha, ricordando cos(ix)=cosh(x) e sin(ix)=isinh(x):

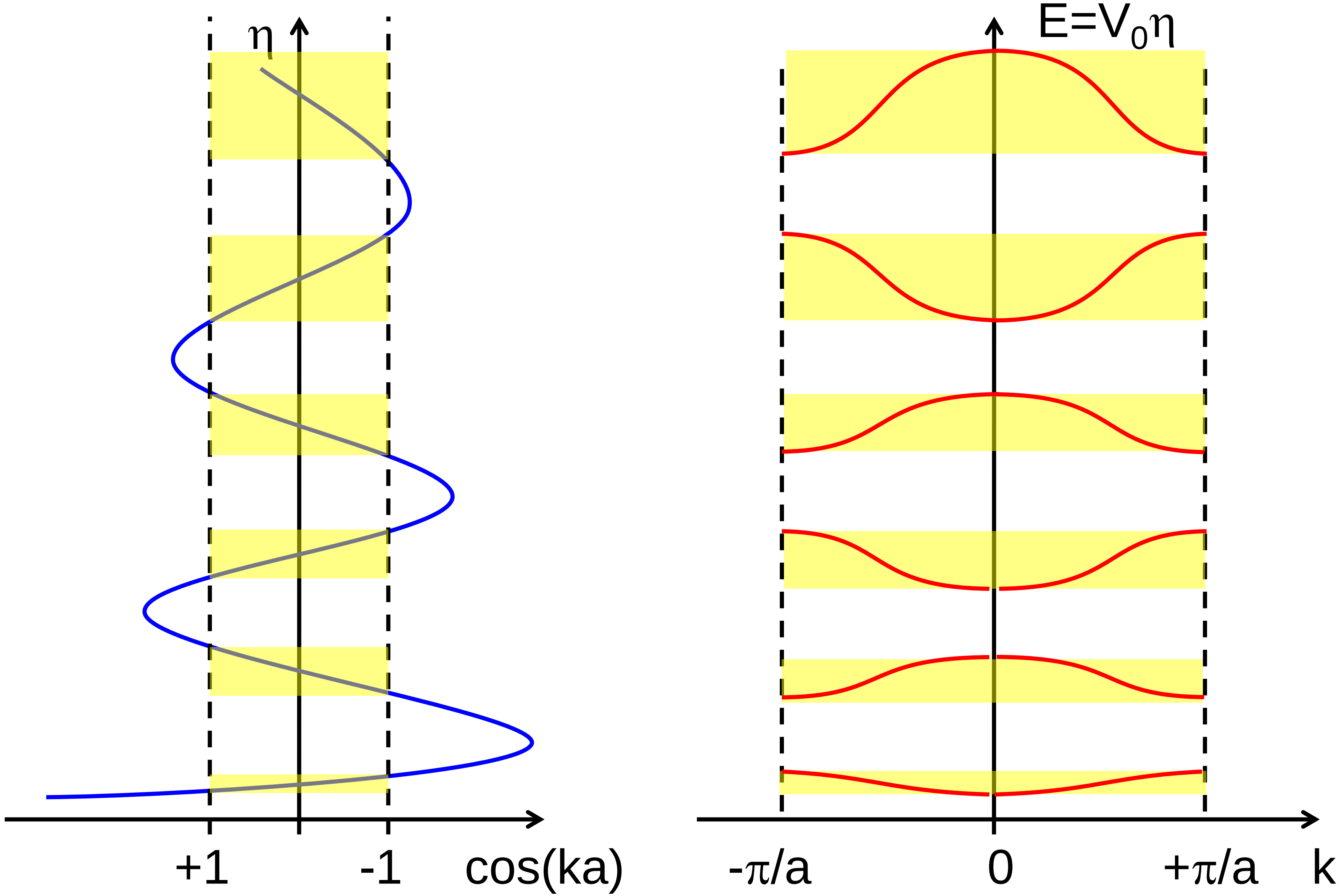
0<η<1

$$\cos \boldsymbol{ka} = \cos \alpha_0 \boldsymbol{w}\sqrt{\eta}\cosh \alpha_0 \boldsymbol{b}\sqrt{1-\eta} - \frac{1-2\eta}{2\sqrt{\eta(1-\eta)}}\sin \alpha_0 \boldsymbol{w}\sqrt{\eta}\sinh \alpha_0 \boldsymbol{b}\sqrt{1-\eta}$$

η>1

$$\cos \boldsymbol{ka} = \cos \alpha_0 \boldsymbol{w}\sqrt{\eta}\cos \alpha_0 \boldsymbol{b}\sqrt{\eta-1} - \frac{2\eta-1}{2\sqrt{\eta(\eta-1)}}\sin \alpha_0 \boldsymbol{w}\sqrt{\eta}\sin \alpha_0 \boldsymbol{b}\sqrt{\eta-1}$$

Soluzione grafica

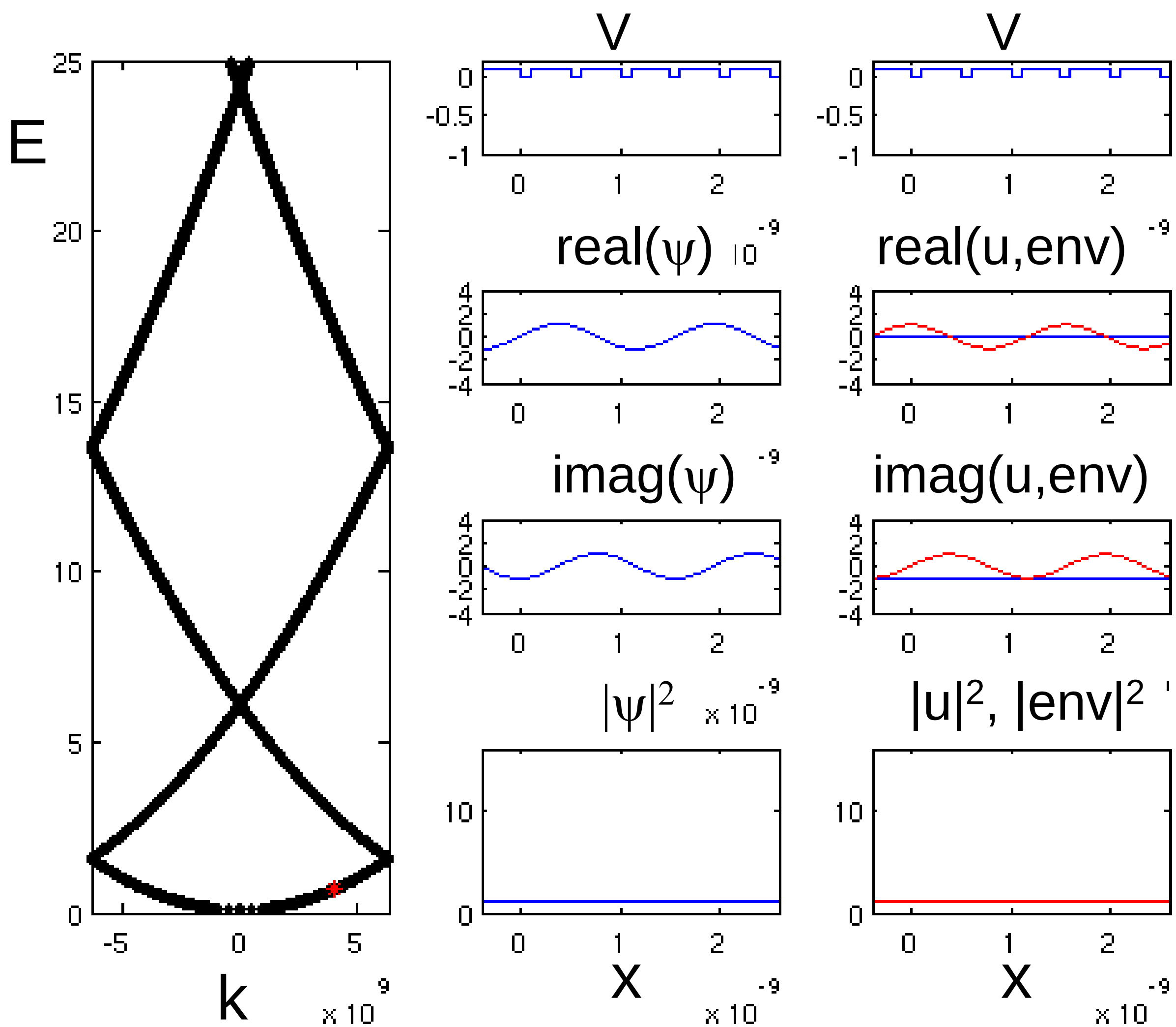


Esercizio 2

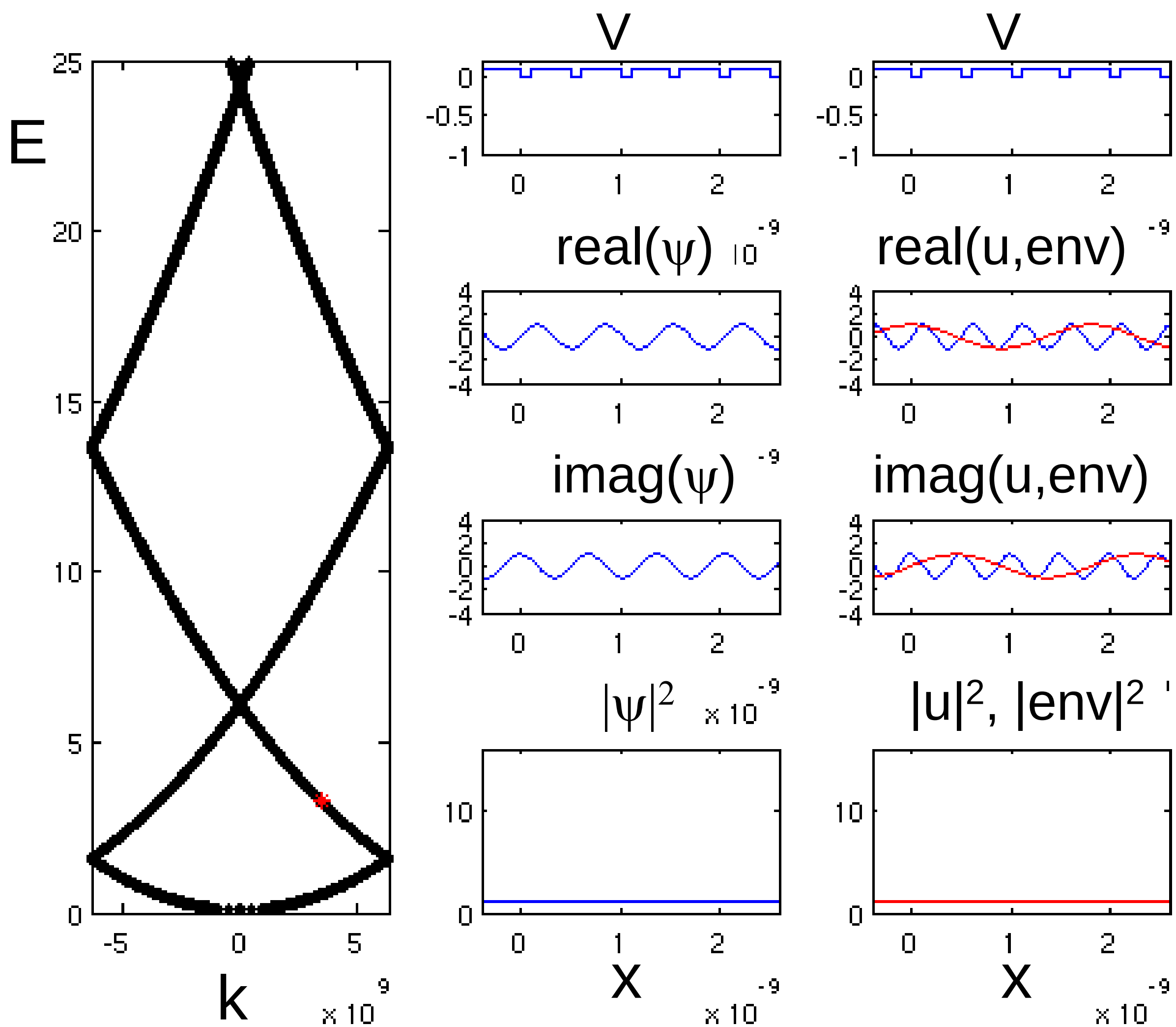
Si consideri lo script ***kronig_penney.m***.

- Studiare la struttura a bande per un reticolo periodico a = 1 Å, b = 4 Å
- Porre V = 0.1 eV (Nfin = 250, Nde = 10). Che relazione di dispersione ci aspettiamo?
- Che aspetto hanno le funzioni di Bloch uk(x) in prima banda? Che aspetto assume la funzione d’onda?
- Discutere l’andamento della funzione di Bloch in seconda banda, confrontandolo con la prima

Esercizio 2 – Banda 1



Esercizio 2 – Banda 2

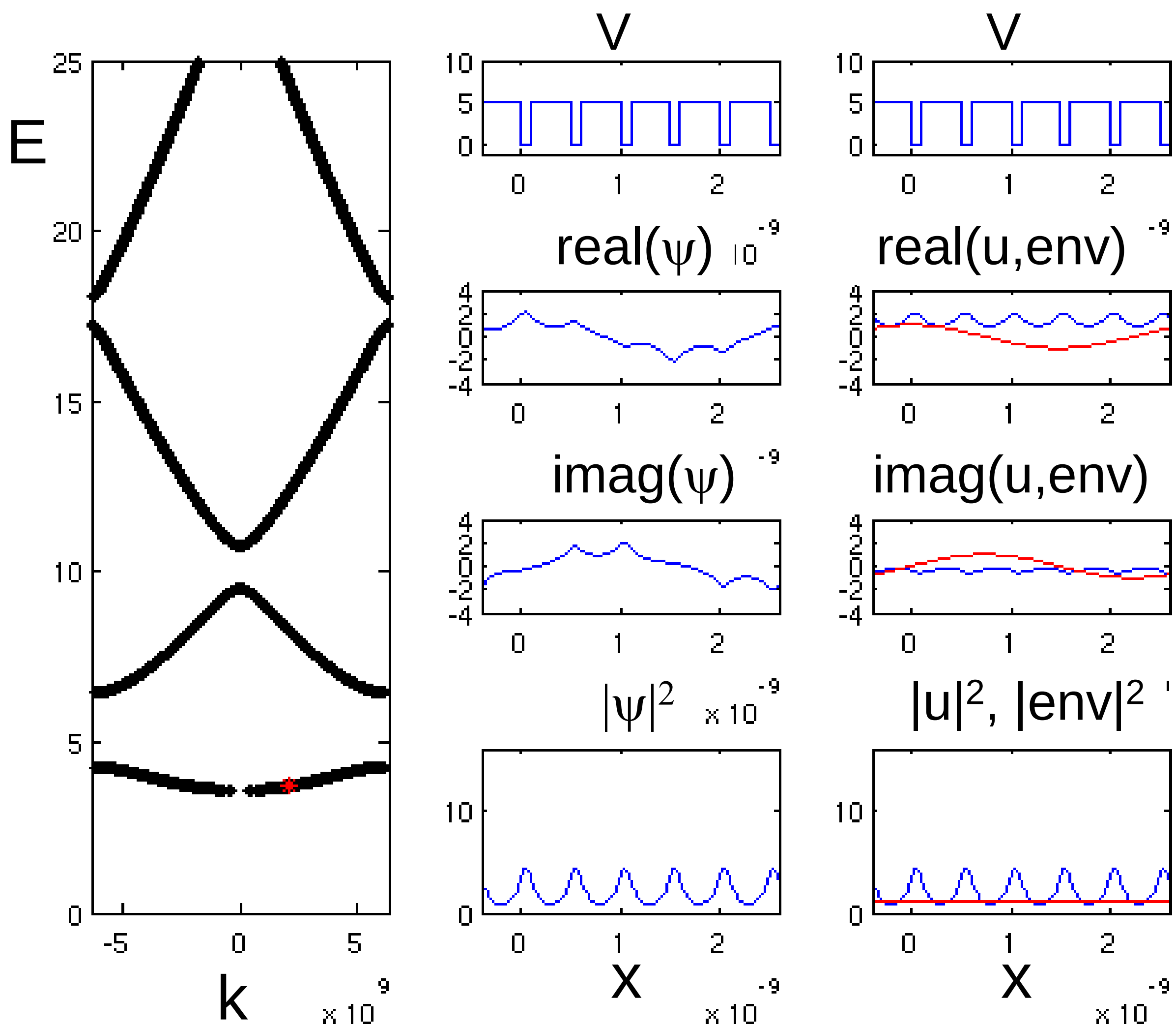


Esercizio 3

Si consideri lo script ***kronig_penney.m***.

- Porre un forte potenziale V = 5 eV (Nfin = 5, Nde = 1000)
- Confrontarlo con il caso di debole potenziale
- Studiare le autofunzioni, le funzioni di Bloch e di inviluppo per le prime due bande
- Osservare la forma delle autofunzioni in corrispondenza del bordo zona e discuterla in base alla teoria del *weak binding*

Esercizio 3 – Banda 1



Esercizio 3 – Banda 2