



Fisica dello Stato Solido

Lezione n. 5

Principi di teoria delle bande

Corso di Laurea Specialistica

Ingegneria Elettronica

a.a.07-08

http://www.de.unifi.it/FISICA/Bruzzi/bruzzi_dida_fss.html

Principi di Teoria delle Bande

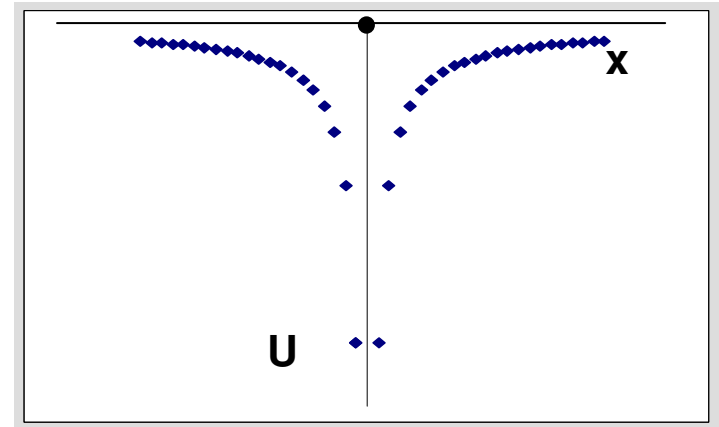
Sommario

Potenziale periodico – Teorema di Bloch – Analisi di Fourier di strutture periodiche - equazione di Schrödinger in forma di set di equazioni algebriche sui coefficienti dello sviluppo di Fourier – approssimazione di potenziale periodico debole – bande di energia proibita - schema a bande della zona estesa e della zona ridotta. Metodo LCAO – Riempimento delle bande – metalli, semiconduttori ed isolanti.

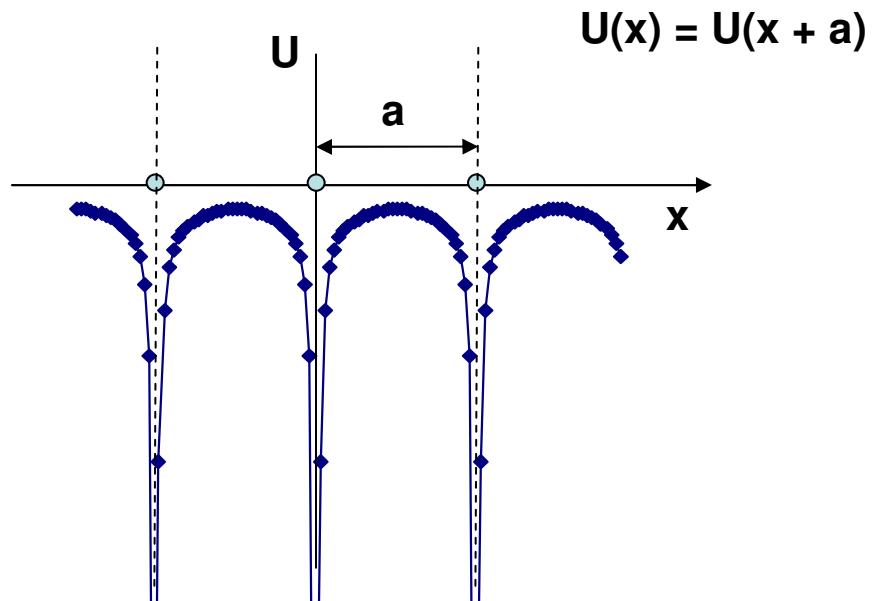
Potenziale Periodico

L'elettrone nel materiale è soggetto al potenziale del reticolo cristallino.

Energia Potenziale elettrone-ione: $U(x) = -\frac{eQ}{4\pi\epsilon_0 x}$



Il potenziale è inoltre periodico con periodicità del reticolo di Bravais



In tre dimensioni:

$$U(\underline{r}) = U(\underline{r} + \underline{R})$$

per ogni \underline{R} vettore del reticolo di Bravais diretto

E' necessario risolvere l'equazione di Schrödinger:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + U(\underline{r}) \right) \varphi(\underline{r}) = \varepsilon \varphi(\underline{r}) \quad (1)$$

che in una dimensione si scrive:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x) \right) \varphi(x) = \varepsilon \varphi(x) \quad (2)$$

Dobbiamo perciò determinare le funzioni d'onda φ soluzioni di questa equazione (autofunzioni) ed i valori corrispondenti di energia ε (autovalori).

Teorema di Bloch

Le funzioni d'onda del tipo: $\varphi_k(x) = u_k(x)e^{ikx}$ con: $u_k(x) = u_k(x + na)$

$a =$ costante reticolare, n numero intero

sono soluzioni dell'equazione (2).

La probabilità di trovare l'elettrone nell'intervallo tra x e $x + dx$ è: $|\varphi(x)|^2$

Perché la funzione d'onda sia soluzione dell'equazione (2) tale probabilità deve essere la stessa per uno stesso dx intorno alla posizione $x + na$ con n numero intero e a = costante di periodicità del potenziale.

$|\varphi(x)|^2 = |\varphi(x + na)|^2$ Perchè questo valga le due funzioni devono essere uguali a meno di una costante di moltiplicazione C :

$$\varphi_k(x + na) = C \varphi_k(x) \quad \text{con:} \quad |C|^2 = 1$$

Definisco k tale che: $C = e^{ika}$, allora: $\varphi_k(x + na) = e^{ika} \varphi_k(x)$, da cui:

$\varphi_k(x) = e^{-ika} \varphi_k(x + na)$ Moltiplico membro a membro per: e^{-ikx} ottenendo:

$e^{-ikx} \varphi_k(x) = e^{-ik(x+a)} \varphi_k(x + na)$. Allora la funzione $u_k(x) = e^{-ikx} \varphi_k(x)$ è tale che:

$u_k(x) = u_k(x + na)$ e $\varphi_k(x) = e^{ikx} u_k(x)$ è soluzione dell'equazione (2).

Le funzioni d'onda $\varphi_k(x) = u_k(x)e^{ikx}$ con: $u_k(x) = u_k(x + na)$

a = costante reticolare, n numero intero

sono dette **funzioni di Bloch**.

Ricordando il caso di assenza di potenziale ove la soluzione e' un onda piana:

$$\varphi_k(x) = Ae^{ikx}$$

Notiamo che la presenza del potenziale periodico provoca una modulazione dell'onda piana secondo la simmetria del reticolo, tale modulazione è rappresentata da $u_k(x)$ ed associata al vettore d'onda k.

Analisi di Fourier della funzione φ

Un altro modo di scrivere la funzione d'onda φ è quello di considerarla come somma di onde piane (serie di Fourier) :

$$\varphi(\underline{r}) = \sum_{\underline{k}} C_k e^{i\underline{k} \cdot \underline{r}}$$

Dove i valori di \underline{k} che compaiono nella serie di Fourier sono **tutti i vettori d'onda permessi dalle condizioni di Born Von Karman**.

Allora risolvere l'equazione di Schroedinger (1-2) significa **trovare l'espressione di tutti i coefficienti C_k** .

Riassumendo:

Abbiamo visto le proprietà generali delle funzioni d'onda di Bloch:

$$\varphi(\underline{r}) = u_k(\underline{r}) e^{i\mathbf{k} \cdot \underline{r}} \quad \text{con} \quad u_k(\underline{r}) = u_k(\underline{r} + \underline{R})$$

\underline{R} vettore del reticolo cristallino

La funzione d'onda di Bloch si può anche scrivere: $\varphi(\underline{r}) = \sum_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \underline{r}}$

Quali sono i metodi utilizzati per il calcolo esplicito dell'eq. di Schrödinger?

1. Bisogna considerare l'Hamiltoniana totale ($H = E_k + U$) per il sistema di M ioni (composti ciascuno dagli elettroni di valenza delle shell piu' interne piu il nucleo dell'atomo) ed N elettroni di valenza.
2. E' necessario fornire una funzione $U(\underline{r})$ periodica nel reticolo.
3. Si risolve quindi l'equazione di Schrödinger: $H\varphi(\underline{r}) = \varepsilon\varphi(\underline{r})$

Per determinare i coefficienti c_K devo procedere come segue:

1. Considero l'analisi di Fourier della funzione U come struttura periodica

Sia U funzione invariante per tutte le traslazioni T del reticolo cristallino

$$\underline{T} = n_1 \underline{a}_1 + n_2 \underline{a}_2 + n_3 \underline{a}_3 \quad \text{con } n_1, n_2, n_3 \text{ NUMERI INTERI}$$

$\underline{a}_1, \underline{a}_2, \underline{a}_3$ vettori primitivi

Allora U può essere espressa in serie di Fourier:
$$U(\underline{r}) = \sum_{\underline{G}} U_{\underline{G}} e^{i \underline{G} \cdot \underline{r}}$$

Dove i valori di \underline{G} che compaiono nella serie di Fourier sono **tutti i vettori del reticolo reciproco**.

Sviluppo i vari termini dell'equazione di Schroedinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \varphi(x)}{\partial x^2} + U(x)\varphi(x) = \varepsilon \varphi(x)$$

inserendo le serie di Fourier per U e ϕ :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \left[\sum_k C_k e^{ik \cdot x} \right] = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_k [k^2 C_k e^{ik \cdot x}]$$

$$U(x)\varphi(x) = \sum_G U_G e^{iG \cdot x} \sum_k C_k e^{ik \cdot x} = \sum_G \sum_k U_G C_k e^{i(G+k) \cdot x}$$

$$\varepsilon \varphi(x) = \varepsilon \sum_k C_k e^{ik \cdot x}$$

$$U(x)\varphi(x) = \sum_G U_G e^{iG \cdot x} \sum_k C_k e^{ik \cdot x} = \sum_G \sum_k U_G C_k e^{i(G+k) \cdot x}$$

Sostituisco $K = G + k$ e inverto le sommatorie:

$$U(x)\varphi(x) = \sum_K \sum_G U_G C_{K-G} e^{iK \cdot x}$$

Sostituendo i vari termini nell'equazione di Schroedinger otteniamo:

$$\sum_K \left[\frac{\hbar^2}{2m} K^2 C_K + \sum_G U_G C_{K-G} \right] e^{iK \cdot x} = \varepsilon \sum_K C_K e^{iK \cdot x}$$

Equazione soddisfatta per ogni K se i coefficienti $e^{iK \cdot x}$ a entrambi membri dell'equazione sono uguali.

$$\frac{\hbar^2}{2m} K^2 C_K + \sum_G U_G C_{K-G} = \varepsilon C_K$$

Definendo il parametro: $\lambda_K = \frac{\hbar^2 K^2}{2m}$

$$(\lambda_K - \varepsilon) C_K + \sum_G U_G C_{K-G} = 0$$

È espressione dell'equazione di Schrödinger in forma di un set di equazioni algebriche sui coefficienti dello sviluppo di Fourier C_K . Essa connette il generico coefficiente di Fourier C_K con ogni altro coefficiente di Fourier per il quale il vettore d'onda differisce da K per un vettore del reticolo reciproco.

Il calcolo di questo set di equazioni può essere molto complesso. In alcuni casi però le componenti rilevanti nella somma $\varphi(\underline{r}) = \sum_{\underline{k}} C_{\underline{k}} e^{i\underline{k} \cdot \underline{r}}$ non sono molte, ed il calcolo si semplifica.

Un utile esempio è quello in cui il potenziale periodico degli ioni sia debole.

Approssimazione di potenziale periodico debole (elettrone quasi libero)

Se il potenziale periodico $U(r)$ dovuto agli ioni è molto debole, esso può considerarsi nullo. L'interazione tra elettrone e reticolo si ha per quei valori di k tali che avvenga diffrazione dell'onda elettronica da parte del reticolo cristallino.

In questa approssimazione si suppone che l'elettrone non interagisca con il reticolo ionico se non quando il suo vettore d'onda \underline{k} è tale da subire un effetto di scattering regolato dalla condizione di Von Laue:

$$\Delta \underline{k} = \underline{G}$$

con \underline{G} vettore di reticolo reciproco.

Poiché l'elettrone è libero l'equazione di Schrödinger diviene:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \varphi(x)}{\partial x^2} = \varepsilon \varphi(x)$$

E la soluzione è un'onda piana del tipo: $\varphi_k(x) = A e^{ikx}$

Con energia: $\varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$.

La funzione d'onda subisce un effetto di scattering per: $\Delta \underline{K} = \underline{K}' - \underline{K} = \underline{G}$

che diviene: $\underline{K}' = \underline{G} + \underline{K}$; elevando al quadrato:

$$K'^2 = G^2 + K^2 + 2\underline{K} \cdot \underline{G}$$

Poiché lo scattering è elastico:

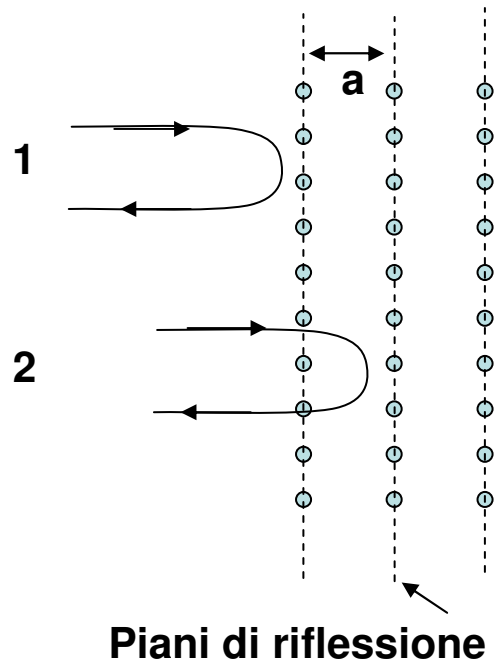
$$|\underline{K}'| = |\underline{K}| \quad \Rightarrow \quad K'^2 = K^2$$

$$G^2 + 2 \underline{K} \cdot \underline{G} = 0$$

Nel caso monodimensionale: $K = \pm \frac{1}{2} G$

se a è costante reticolare del cristallo: $R = na$ e $G = \frac{2\pi}{a} n$

 $K = \pm \frac{\pi}{a} n$ condizione di interferenza costruttiva tra onda incidente e onda riflessa.



Le onde 1 e 2 interferiscono costruttivamente se:

$$2a = n\lambda$$

Poiché: $\lambda = \frac{2\pi}{k}$ otteniamo $k = \frac{n\pi}{a}$

Onda incidente: $\varphi_1 = Ae^{i\frac{\pi}{a}x}$

Sia $n = 1$

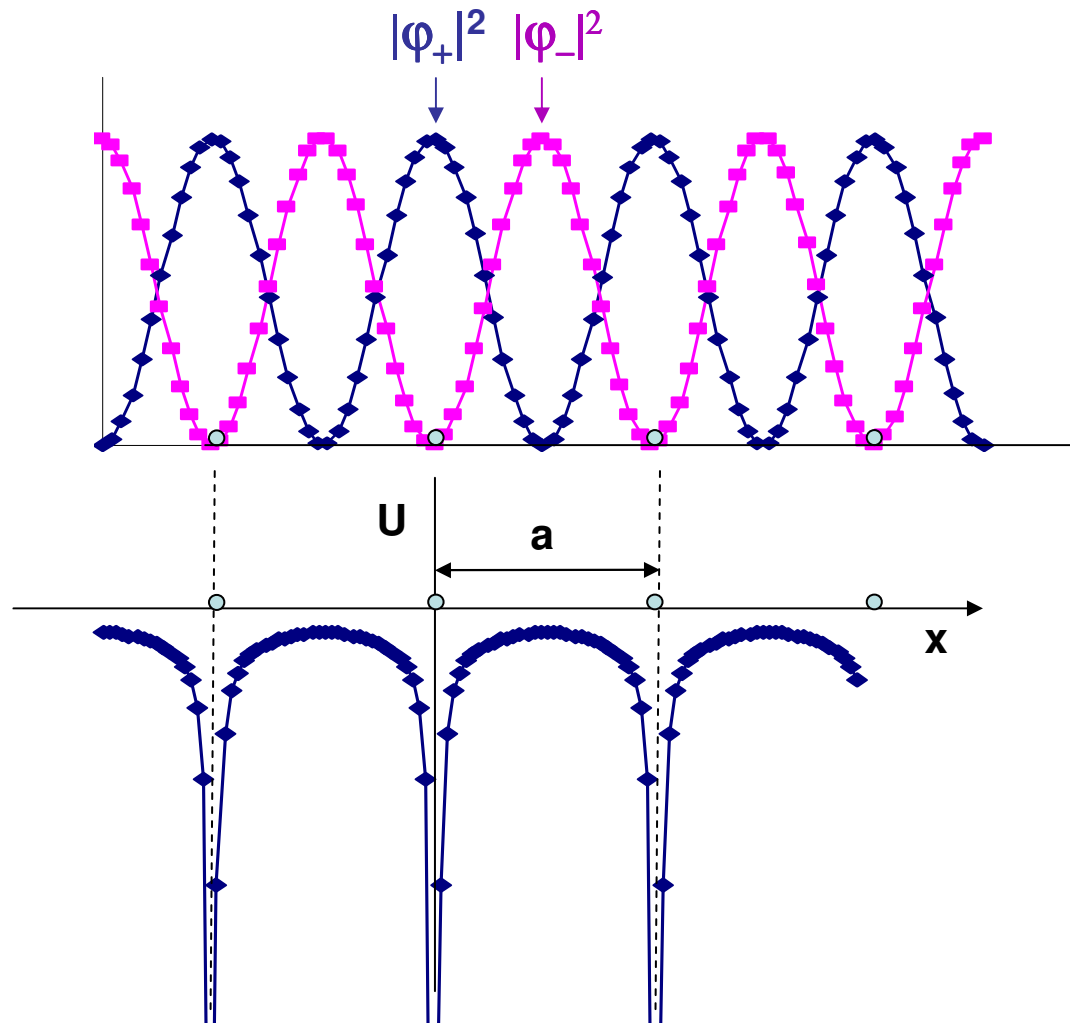
Onda riflessa: $\varphi_2 = Ae^{-i\frac{\pi}{a}x}$

L'interferenza tra le due onde produce un'onda stazionaria. Per stesso valore di k ho due combinazioni possibili:

$$\varphi_+ = \varphi_1 + \varphi_2 = A \left(e^{i\frac{\pi}{a}x} + e^{-i\frac{\pi}{a}x} \right) = 2A \cos\left(\frac{\pi}{a}x\right)$$

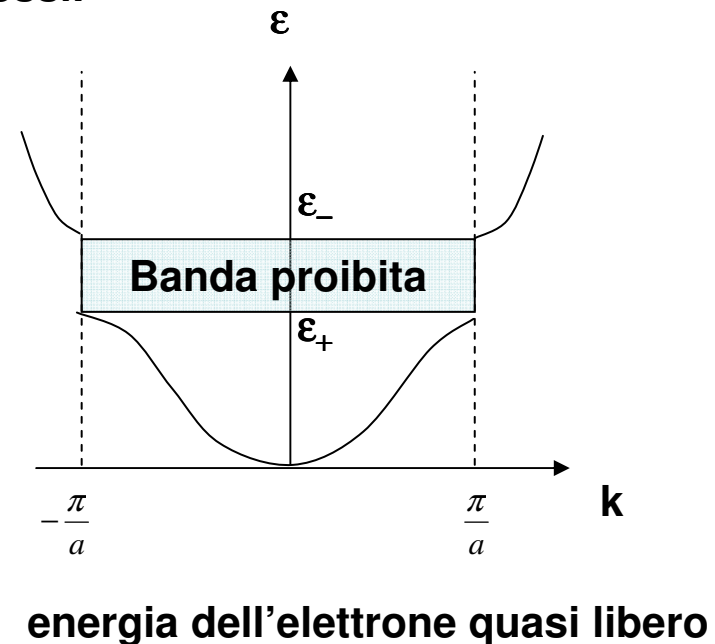
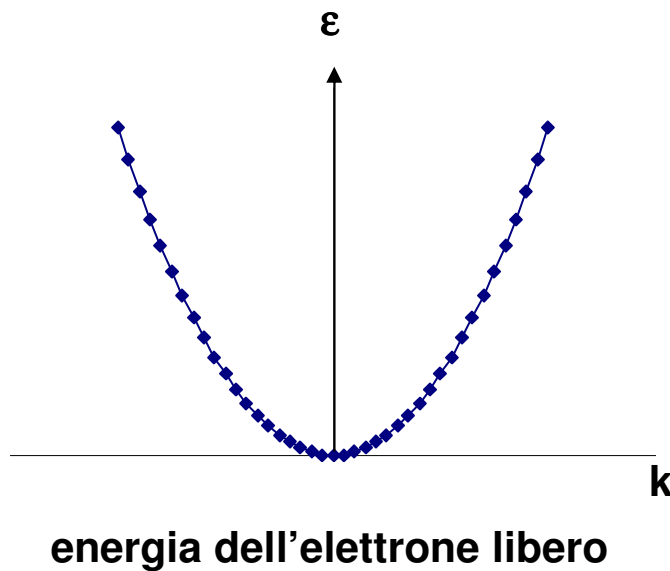
$$\varphi_- = \varphi_1 - \varphi_2 = A \left(e^{i\frac{\pi}{a}x} - e^{-i\frac{\pi}{a}x} \right) = 2A \sin\left(\frac{\pi}{a}x\right)$$

La funzione ϕ_+ accumula carica elettronica sugli ioni positivi, ad essa corrisponde l'energia ε_+ . La funzione ϕ_- accumula carica elettronica tra gli ioni positivi, ad essa quindi corrisponde un'energia ε_- maggiore di ε_+ .



Per k lontano dai valori $\pm \frac{n\pi}{a}$ l'energia è quella dell'elettrone libero
e la soluzione è unica, l'onda elettronica è progressiva o regressiva.

Per $k = \frac{n\pi}{a}$ ho due soluzioni, funzioni d'onda stazionarie,
corrispondenti a due valori di energia permessi.



Tornando all' espressione dell'equazione di Schrödinger in forma di un set di equazioni algebriche sui coefficienti dello sviluppo di Fourier C_K .

$$(\lambda_K - \varepsilon)C_K + \sum_G U_G C_{K-G} = 0$$

Nel caso dell'elettrone quasi libero se vogliamo descrivere l'interazione tra le due onde incidente e diffusa dobbiamo considerare lo sviluppo di Fourier:

$$\varphi(\underline{r}) = \sum_{\underline{k}} C_{\underline{k}} e^{i\underline{k} \cdot \underline{r}}$$

come somma dei soli due termini con \underline{K} e \underline{K}' tali che $\Delta \underline{K} = \underline{G} \Rightarrow \underline{K}' - \underline{G} = \underline{K}$.

il set di equazioni si riduce a due equazioni, una per il coefficiente C_K e l'altra per C_{K-G} :

$$\left\{ \begin{array}{l} (\lambda_K - \varepsilon)C_K + U_1 C_{K-G} = 0 \\ (\lambda_{K-G} - \varepsilon)C_{K-G} + U_1 C_K = 0 \end{array} \right.$$

Ove abbiamo posto $U_G = U_{-G} = U_1$

$$\begin{cases} (\lambda_K - \varepsilon)C_K + U_1 C_{K-G} = 0 \\ (\lambda_{K-G} - \varepsilon)C_{K-G} + U_1 C_K = 0 \end{cases}$$

Il sistema ha soluzione solo se il determinante dei coefficienti è nullo

$$\begin{vmatrix} (\lambda_K - \varepsilon) & U_1 \\ U_1 & (\lambda_{K-G} - \varepsilon) \end{vmatrix} = 0$$

$$(\lambda_K - \varepsilon)(\lambda_{K-G} - \varepsilon) - U_1^2 = 0$$

Equazione con due radici: $\varepsilon = \frac{1}{2}(\lambda_{K-G} + \lambda_K) \pm \sqrt{\frac{1}{4}(\lambda_{K-G} - \lambda_K)^2 + U_1^2}$

$$\varepsilon = \frac{1}{2}(\lambda_{K-G} + \lambda_K) \pm \sqrt{\frac{1}{4}(\lambda_{K-G} - \lambda_K)^2 + U_1^2}$$

(1) Caso di bordo zona: $K = \frac{1}{2} G$.

Noto che poiché $K^2 = K'^2$ allora: $\lambda_K = \lambda_{K-G}$. Abbiamo le due soluzioni:

$$\varepsilon_1 = \lambda_1 + U_1 \qquad \varepsilon_2 = \lambda_1 - U_1$$

Separate dal valore $2U_1$. Le due soluzioni :

$$\varphi_+ = C_K e^{iKx} + C_{K-G} e^{i(K-G)x} = C_{\frac{1}{2}G} e^{i\frac{1}{2}Gx} + C_{-\frac{1}{2}G} e^{-i\frac{1}{2}Gx}$$

$$\varphi_- = C_K e^{iKx} - C_{K-G} e^{i(K-G)x} = C_{\frac{1}{2}G} e^{i\frac{1}{2}Gx} - C_{-\frac{1}{2}G} e^{-i\frac{1}{2}Gx}$$

Con $G = \frac{2\pi}{a}$ esse si riducono al caso visto a pag. 14

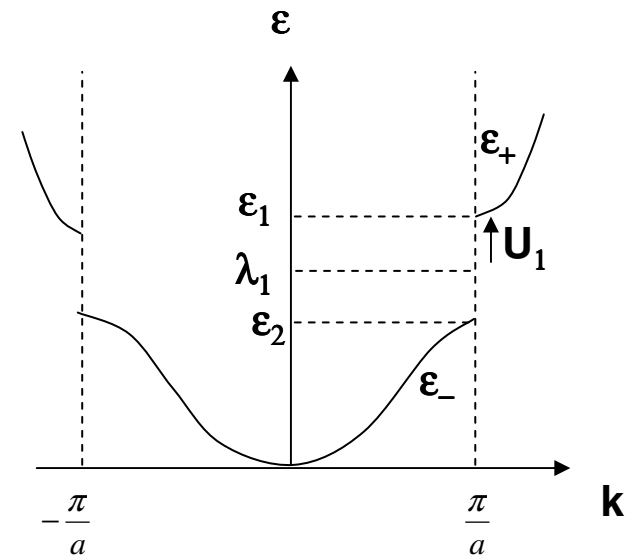
$$\varepsilon = \frac{1}{2}(\lambda_{K-G} + \lambda_K) \pm \sqrt{\frac{1}{4}(\lambda_{K-G} - \lambda_K)^2 + U_1^2}$$

(2) Vicino a bordo zona:

Definisco δ tale che $K = \frac{1}{2} G \pm \delta$. Si ottengono le soluzioni:

$$\begin{aligned} \varepsilon_+ &= \varepsilon_1 + \frac{\hbar^2 \delta^2}{2m} \left(1 + \frac{2\delta}{U_1} \right) \\ \varepsilon_- &= \varepsilon_2 + \frac{\hbar^2 \delta^2}{2m} \left(1 - \frac{2\delta}{U_1} \right) \end{aligned} \quad \text{Con:} \quad \begin{aligned} \varepsilon_1 &= \lambda_1 + U_1 \\ \varepsilon_2 &= \lambda_1 - U_1 \end{aligned}$$

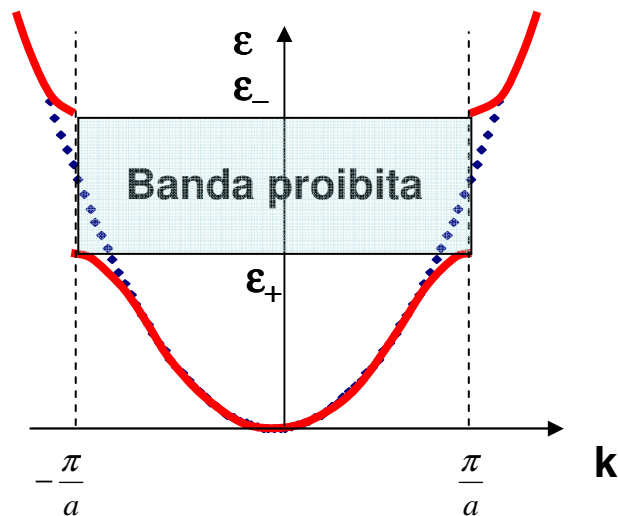
L'energia dipende da δ^2 perciò ha andamento parabolico nelle vicinanze di $\frac{1}{2} G$. Poiché si può ipotizzare che $\lambda_1/U_1 \gg 1$ (potenziale debole) il coefficiente che moltiplica il termine in δ^2 è negativo e quindi la concavità è negativa per il caso ε_- .



Perciò per k lontano dai valori $\pm \frac{n\pi}{a}$ l'energia è quella dell'elettrone libero e la soluzione è unica, l'onda elettronica è progressiva o regressiva.

Per $k = \frac{n\pi}{a}$ ho due soluzioni, funzioni d'onda stazionarie,

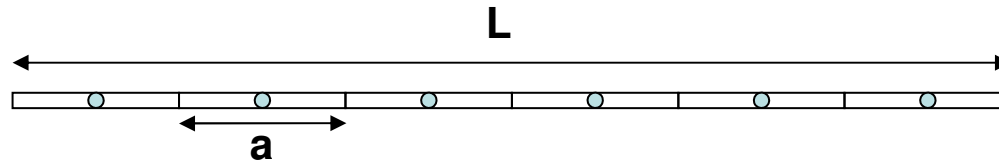
corrispondenti a due valori di energia permessi. Vicino a bordo zona ho piegamento della funzione $\varepsilon(k)$ in modo da avere tangente nulla a bordo zona. Si creano così **BANDE DI ENERGIA PROIBITA**.



energia dell'elettrone quasi libero

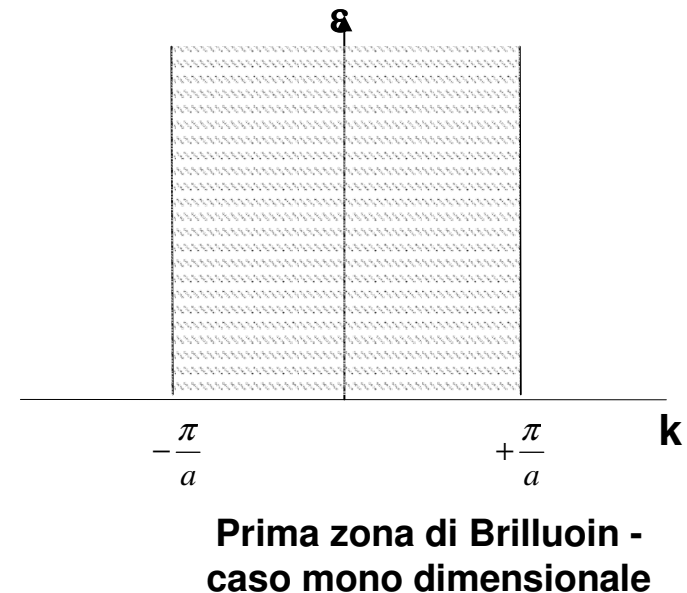
K permessi e I zona di Brilluoin

Poiché $L = Na$ con N numero di celle primitive lungo il reticolo unidimensionale



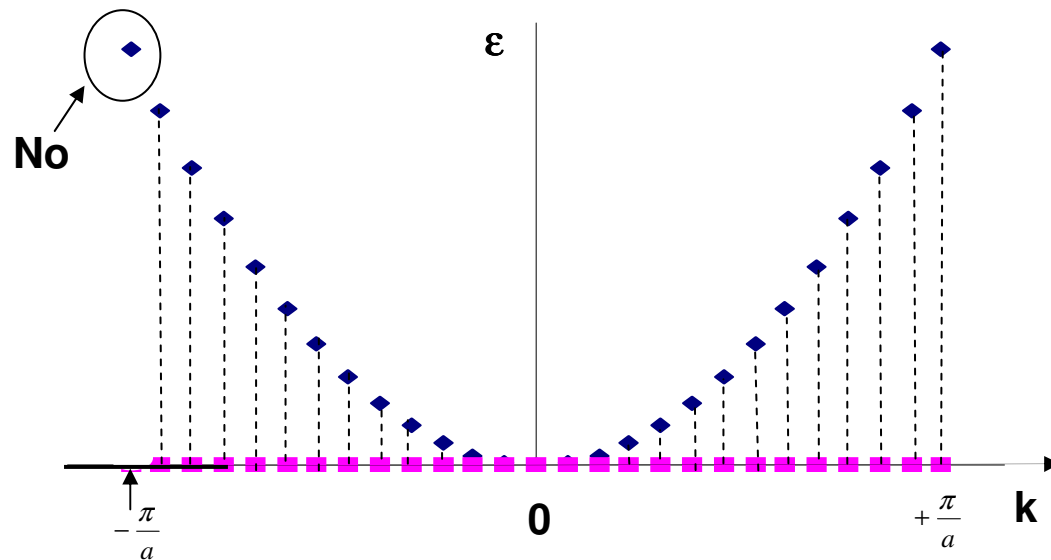
Allora i k permessi sono: $k = \pm \frac{2\pi}{a} \frac{m}{N}$ con m intero.

Ricordiamo che la I prima zona di Brilluoin è data dallo spazio k più vicino ad un punto del reticolo reciproco che ad ogni altro punto del reticolo reciproco. Allora la prima zona di Brilluoin, nel caso unidimensionale, è data da tutti i k compresi tra $-\frac{1}{2}G = -\frac{\pi}{a}$ e $+\frac{1}{2}G = +\frac{\pi}{a}$.



La serie dei k permessi nella prima zona di Brilluoin è: $k = \frac{2\pi}{a} \frac{m}{N}$
 con m che va da 1 a N , trasportando quindi i valori ottenuti all'interno della I
 zona di Brilluoin (con trasformazione $k \rightarrow k - \frac{2\pi}{a}$).

**Esempio per elettrone libero senza potenziale
periodico**



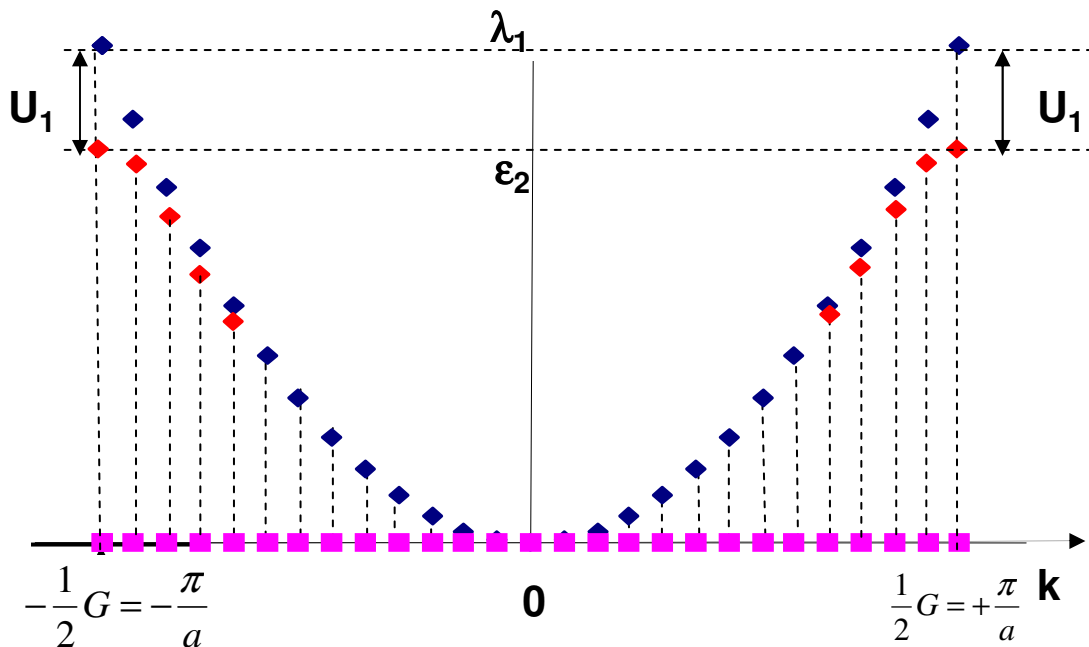
Prima zona di Brilluoin:
 caso mono dimensionale
 con **$N = 26$**

N è in genere molto grande, ad esempio, se a (costante reticolare) = $4\text{\AA} = 4 \cdot 10^{-10}\text{m}$
 ed $L = 4\text{cm}$, allora $N = 10^8$! Per questo si utilizza l'approssimazione del continuo
 nei grafici $\epsilon(k)$.

$$\begin{aligned} \varepsilon_+ &= \varepsilon_1 + \frac{\hbar^2 \delta^2}{2m} \left(1 + \frac{2\delta}{U_1} \right) & \text{Con: } \varepsilon_1 &= \lambda_1 + U_1 \\ \varepsilon_- &= \varepsilon_2 + \frac{\hbar^2 \delta^2}{2m} \left(1 - \frac{2\delta}{U_1} \right) & \varepsilon_2 &= \lambda_1 - U_1 \end{aligned}$$

Caso di ε_- ($-\frac{1}{2}G < k < +\frac{1}{2}G$)

- ◆ Elettrone libero
- ◆ Elettrone quasi libero



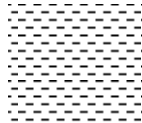
SCHEMA DELLA ZONA ESTESA

Caso di ε_+ ed ε_- su più zone di Brilluoin

- ◆ Elettrone libero
- ◆ Elettrone quasi libero



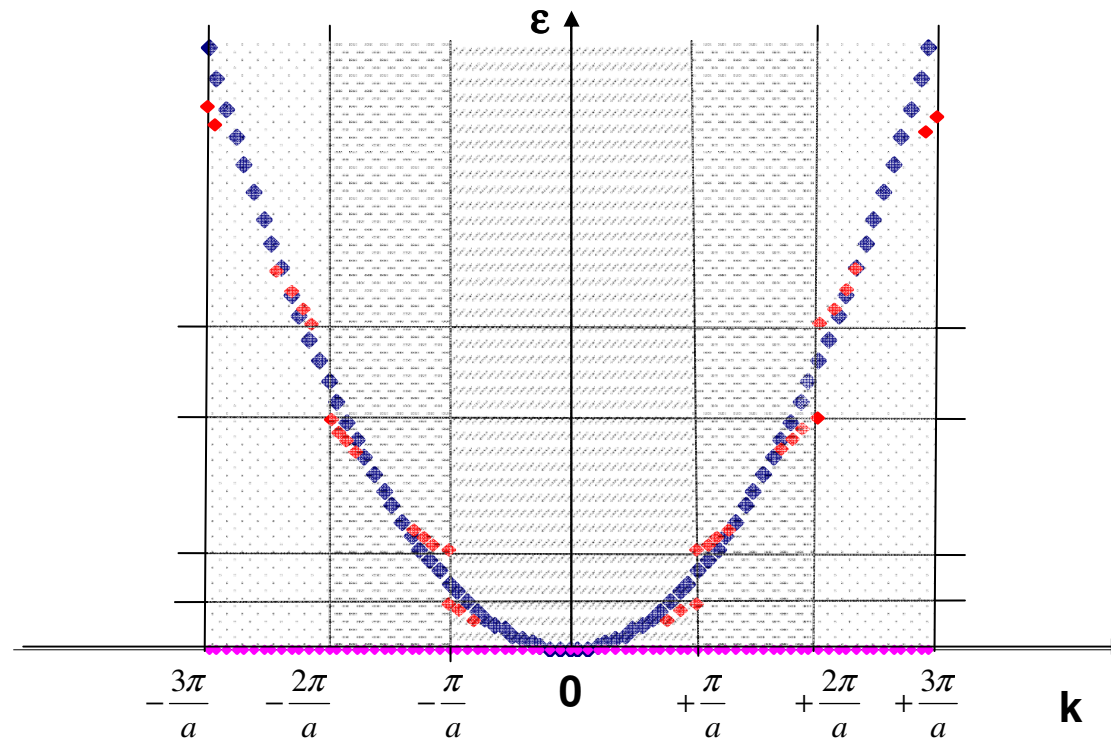
I zona di Brilluoin



II zona di Brilluoin

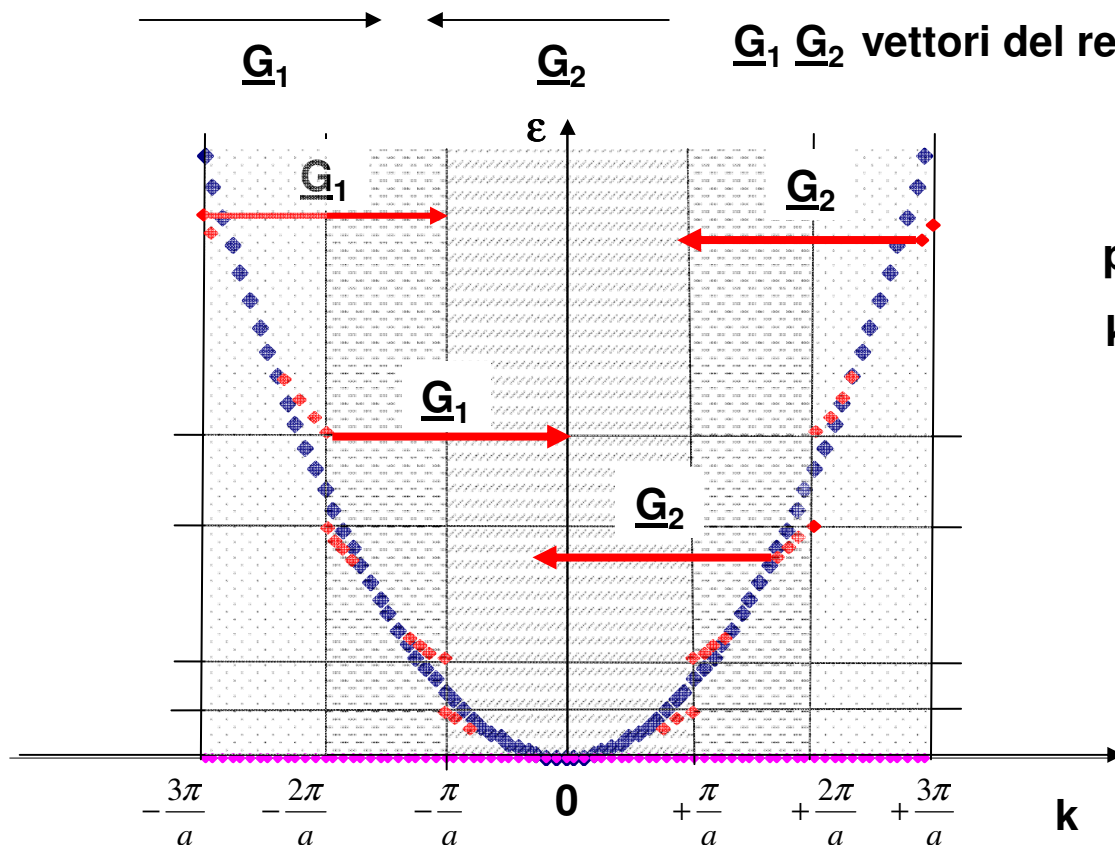


III zona di Brilluoin



SCHEMA DELLA ZONA RIDOTTA

E' possibile e spesso conveniente scegliere il vettore d'onda k indice della funzione di Bloch in modo che esso giaccia sempre entro la I zona di Brillouin



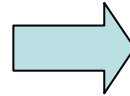
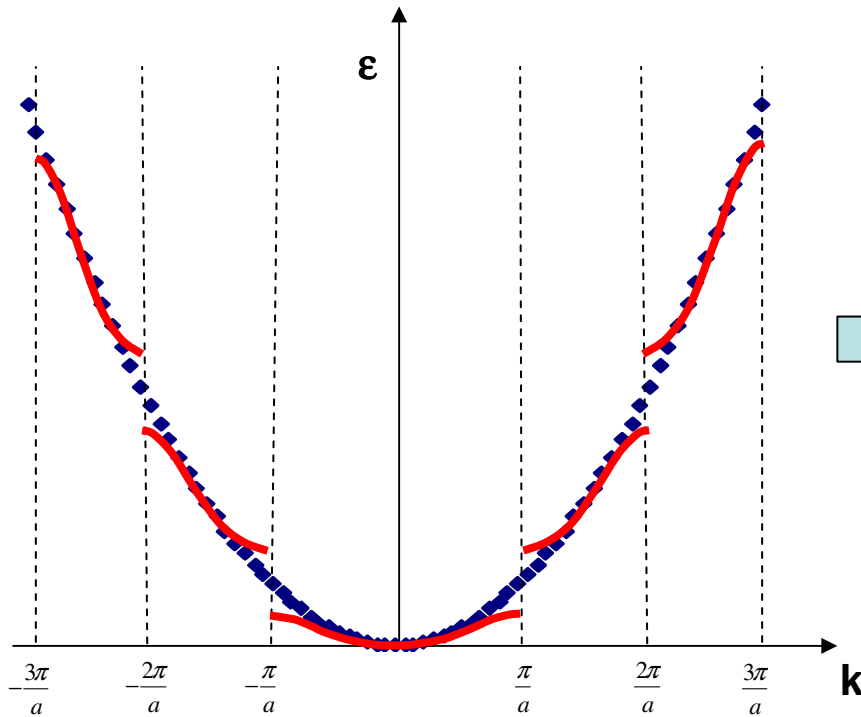
Sia k' vettore d'onda al di fuori della prima zona. Allora esiste G tale che:
 $k = k' - G$ giaccia entro la prima zona di Brillouin

$$\begin{aligned}\varphi_{k'}(x) &= e^{ik'x} u_{k'}(x) = \\ &= e^{ikx} [e^{iGx} u_{k'}(x)] = \\ &= e^{ikx} u_k(x) = \varphi_k(x)\end{aligned}$$

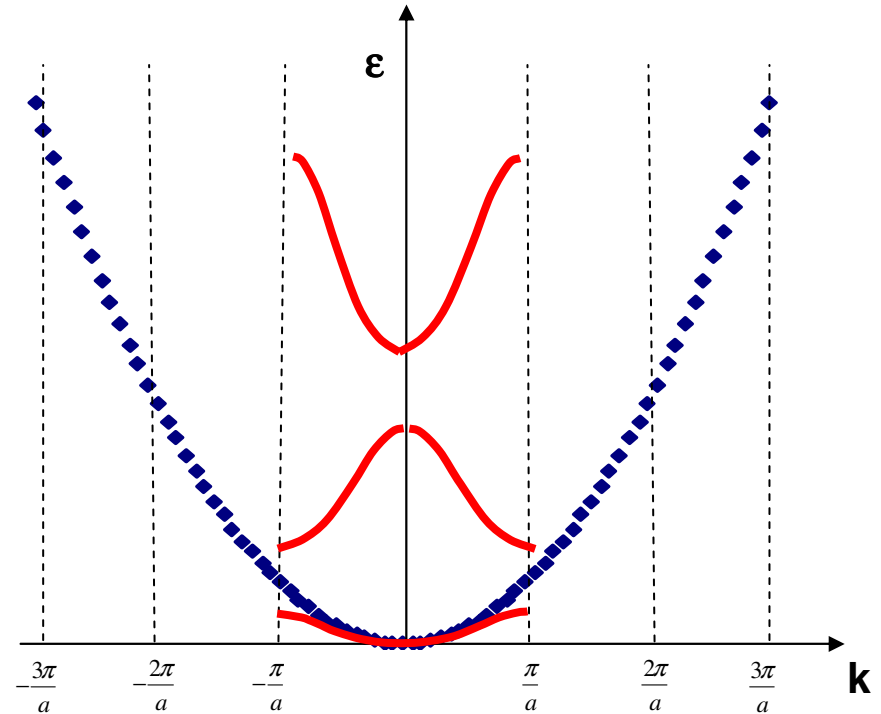
con $u_k(x) = e^{iGx} u_{k'}$

Poiché sia e^{iGx} che $u_{k'}(x)$ hanno la periodicità a data dal reticolo cristallino anche per $u_k(x)$ così definita vale che $u_k(x) = u_k(x+a)$.

SCHEMA DELLA ZONA ESTESA



SCHEMA DELLA ZONA RIDOTTA



Ci sono altri metodi per risolvere l'equazione di Schroedinger quando il potenziale periodico non può essere ritenuto debole. Citiamo ad esempio il metodo degli orbitali atomici LCAO .

Questo metodo segue il suggerimento originale di Bloch di approssimare la funzione d'onda nel cristallo mediante una combinazione lineare di orbitali atomici (Linear Combination of Atomic Orbitals). La funzione d'onda scelta è del tipo:

$$\varphi_k = A \sum_{\underline{R}} e^{i\vec{k} \cdot \underline{r}} \phi(\underline{r} - \underline{R})$$

Con A fattore di normalizzazione e $\phi(\underline{r} - \underline{R})$ funzione d'onda atomica centrata su \underline{R} vettore del reticolo cristallino.

Per ogni coppia di orbitali separati da \underline{R} avremo l'integrale di scambio o sovrapposizione S come nel caso molecolare.

$$S = \int \varphi(\underline{r}) \varphi(\underline{r} + \underline{R}) dV$$

Nel calcolo si considerano solo le interazioni tra primi vicini.

Determinazione delle bande di energia con metodo LCAO

LCAO applicata ad una molecola biatomica

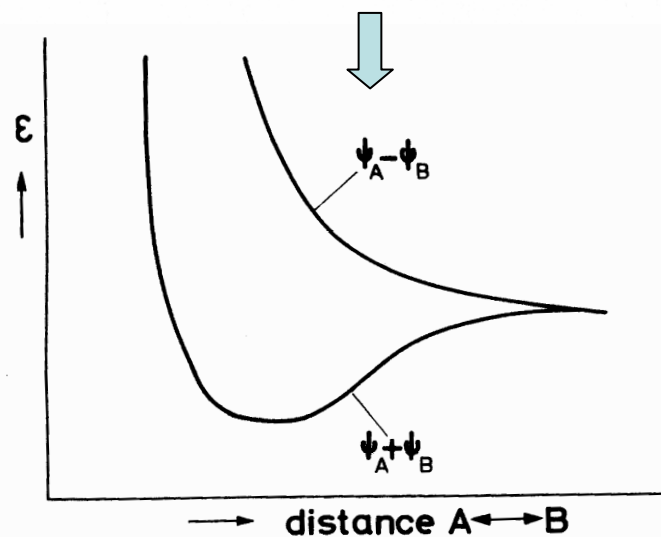
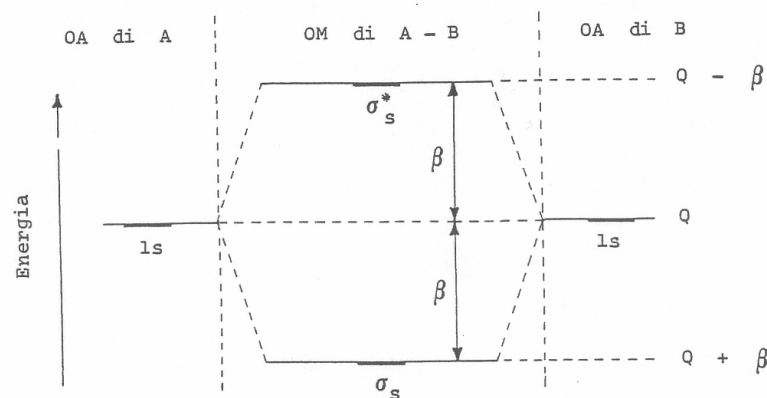


Fig. 2.6. Energy of a two-atomic molecule AB as a function of the atomic distance

LCAO applicata al solido

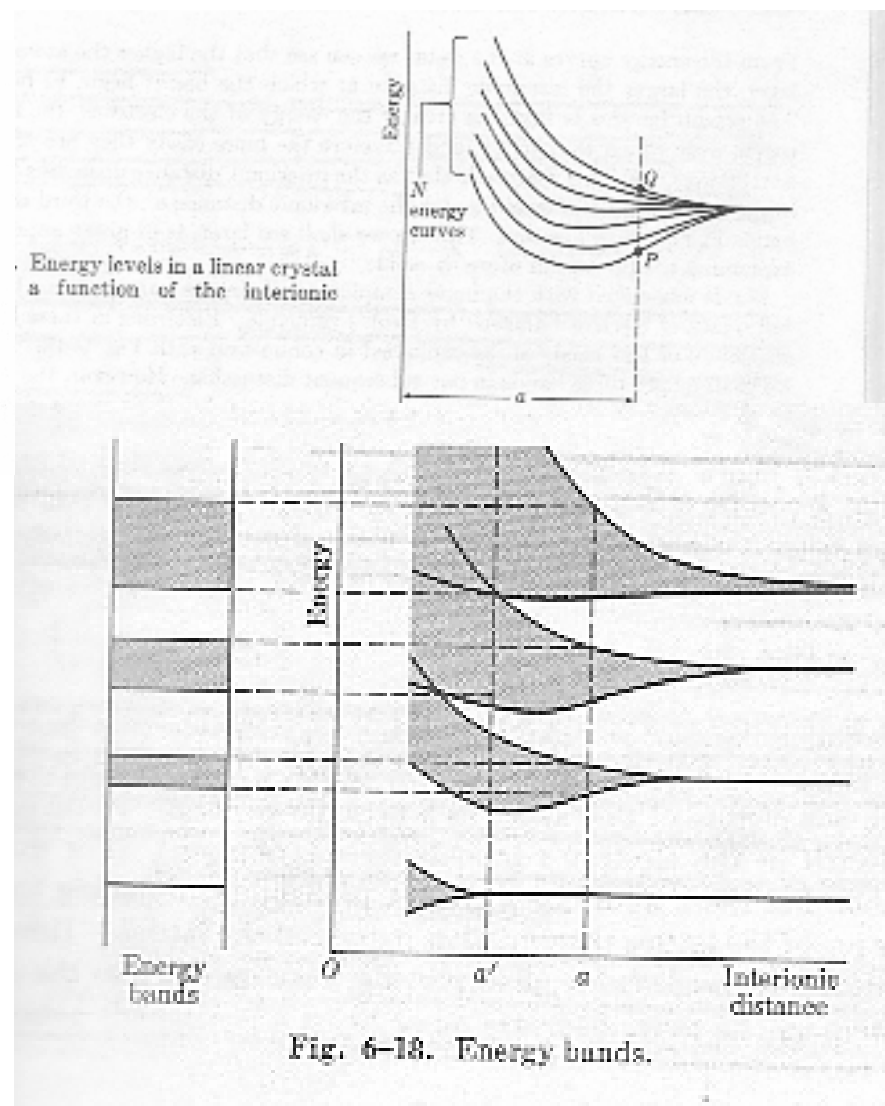
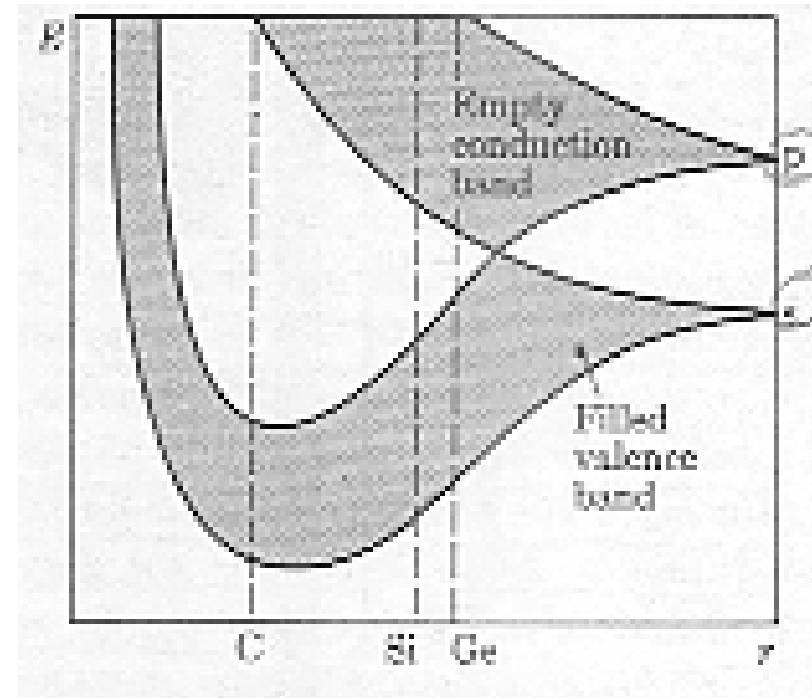
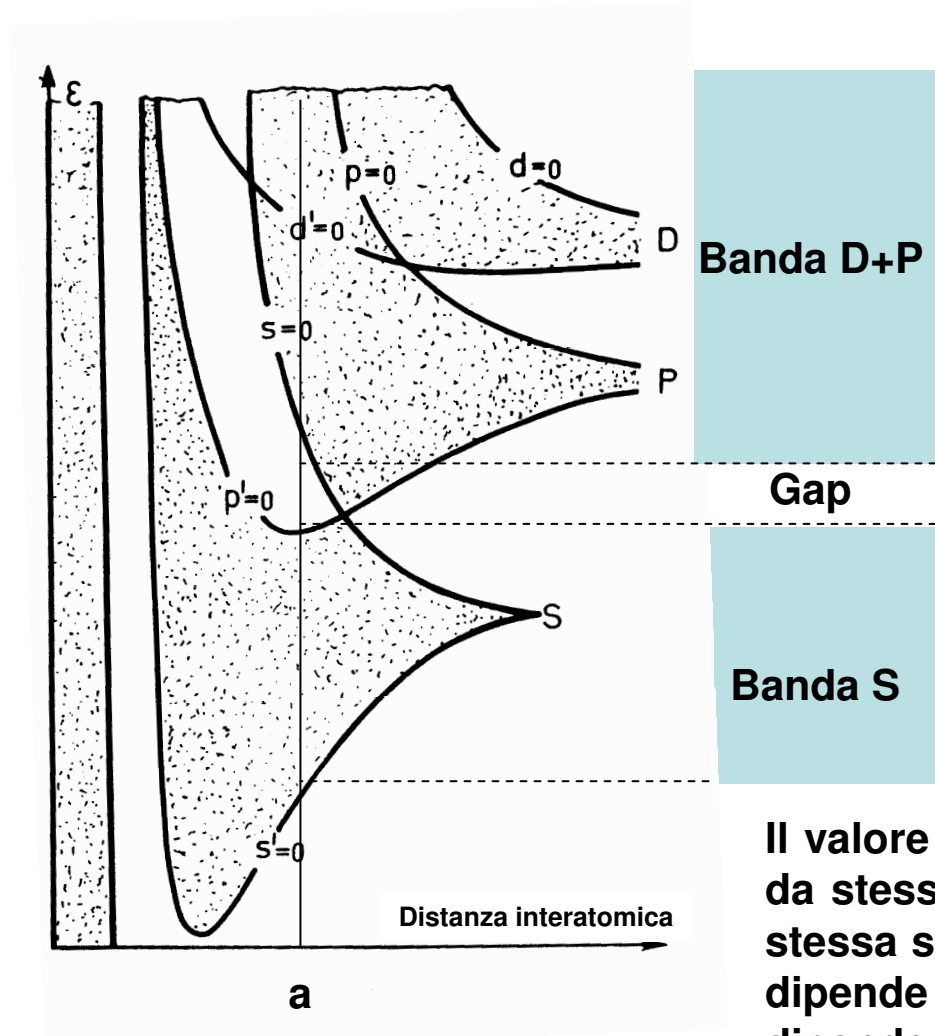


Fig. 6-18. Energy bands.

Diagramma a bande con metodo LCAO in funzione della costante reticolare a



Il valore del gap è diverso in Si, C, Ge, caratterizzati da stessa configurazione elettronica esterna e dalla stessa struttura cristallina (IV gruppo) perché esso dipende dalla diversa costante reticolare, valore dipendente anche dalla dimensione dell'atomo.

a = costante reticolare all'equilibrio

Riempimento delle bande: Bande piene e semipiene

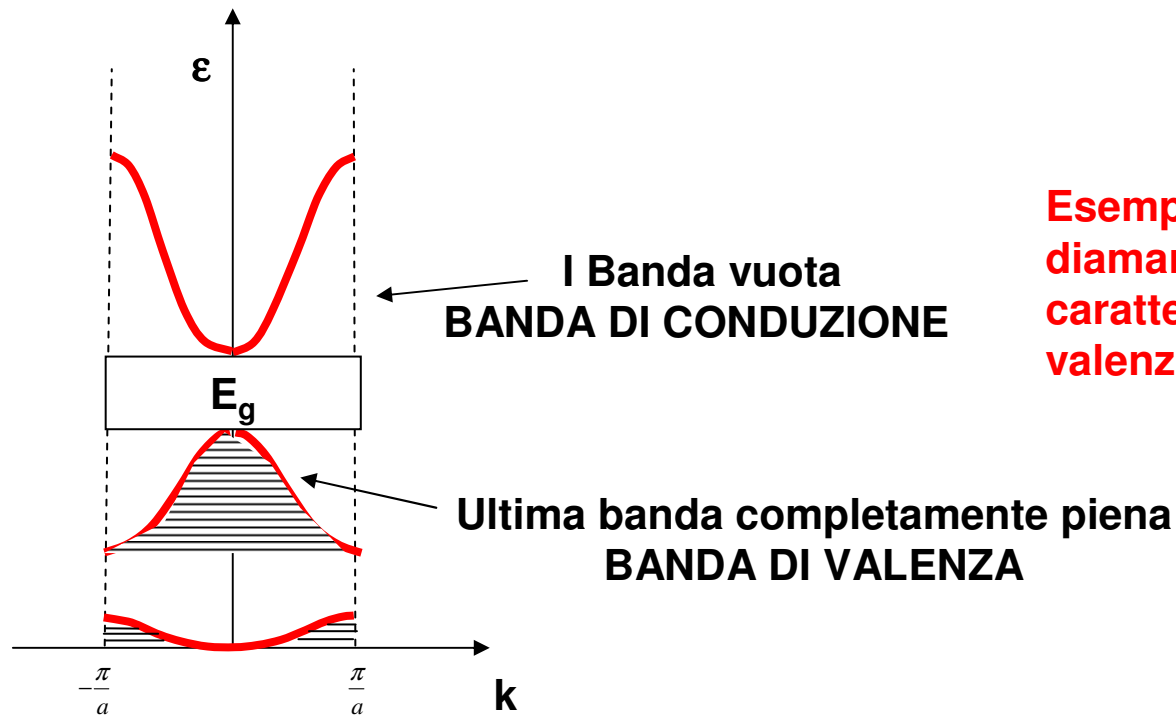
Lo schema della zona ridotta ha portato ad avere n bande di energia $\varepsilon_n(k)$ con k nella 1^a zona di Brilluoin. Per ogni banda abbiamo visto che vi sono $2N$ stati indipendenti (caratterizzati dal vettore d'onda k e orientazione di spin per ogni banda di energia) con N numero di atomi nel cristallo. Perciò se nella shell più esterna di ogni atomo è presente un solo elettrone di valenza la banda di energia più elevata risulterà riempita a metà di elettroni. Se invece ciascun atomo contribuisce con due elettroni alla banda essa risulterà completamente piena.

Semiconduttori ed Isolanti

Se a $T = 0$ gli elettroni riempiono completamente la banda di energia più elevata il materiale è isolante e l'applicazione di un campo elettrico esterno non darà luogo al passaggio di corrente. Infatti se la banda completamente piena è separata da un gap di energia dalla banda completamente vuota successiva ad energia più elevata non ci sarà alcun modo per far variare il vettore d'onda dell'elettrone: tutti gli stati accessibili sono pieni e nulla cambia quando il campo è applicato.

Semiconduttori

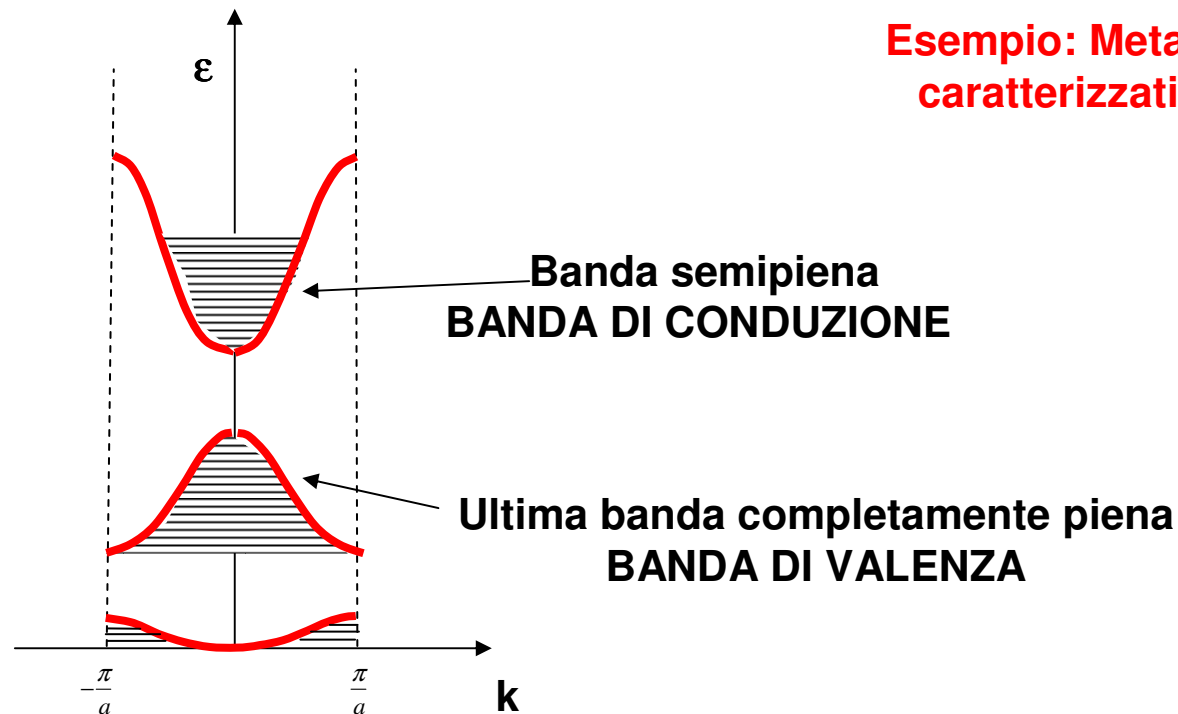
La banda di energia proibita tra l'ultima banda completamente piena (**banda di valenza**) e la prima completamente vuota (**banda di conduzione**) si indica con E_g (energy gap).



Esempio: semiconduttori quali diamante, silicio germanio, caratterizzati da 8 elettroni di valenza per cella primitiva.

Metalli

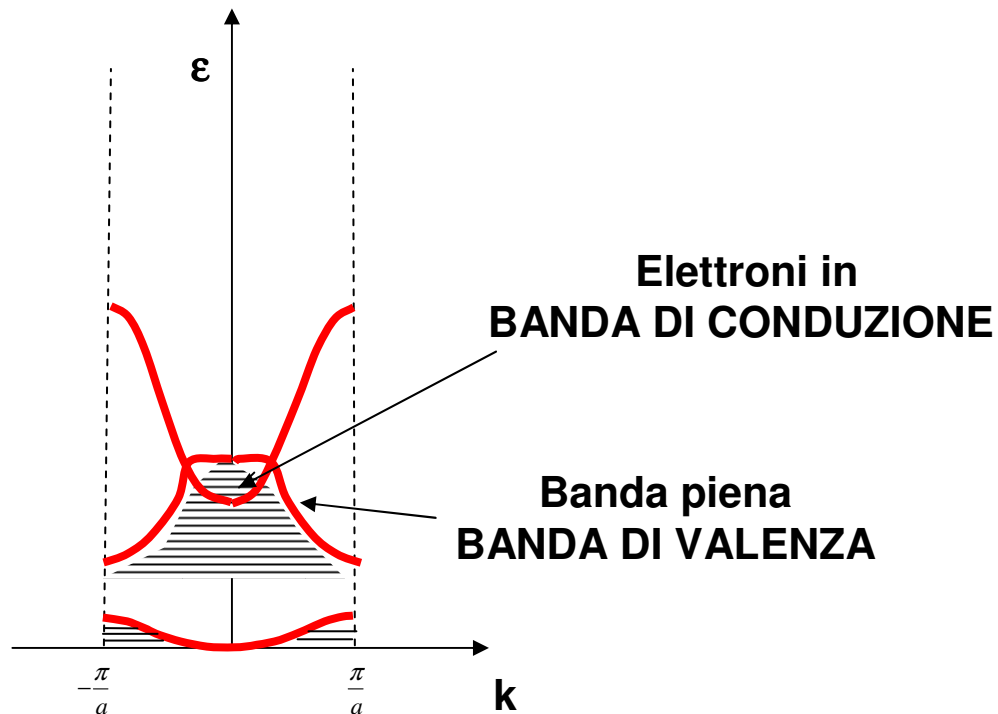
Se a $T = 0$ gli elettroni riempiono NON completamente la banda di energia più elevata il materiale è metallico e l'applicazione di un campo elettrico esterno dà luogo al passaggio di corrente. Tale banda si dice **BANDA DI CONDUZIONE**.



**Esempio: Metalli alcalini, metalli nobili
caratterizzati da shell ns semipiene**

Semi Metalli

Possono esserci cristalli con numero pari di elettroni di valenza per cella primitiva che si comportano da metalli, perché più bande si sovrappongono in energia.



Esempio: metalli delle terre alcaline (shell ns completamente piene e quindi due elettroni di valenza per cella).