

# Fizica Corpului Solid

**Consultații**  
**Miercuri, 15:00-17:00**

## § Ecuația Schrödinger pentru cristale

**Cristale** → un ansamblu de  $\bar{e}$  și nuclee atomice.

La general ec. Schrödinger pentru cristal:

$$\hat{H}\Psi(\vec{r}_i, \vec{R}_j) = \varepsilon \Psi(\vec{r}_i, \vec{R}_j)$$

unde:  $\hat{H}$  – operatorul Hamiltonian,  $\vec{r}_i$  – coordonatele  $\bar{e}$ ,  
 $\vec{R}_j$  – coordonatele nucleelor atomice,  
 $\varepsilon$  – energia totală a cristalului.

Rezolvarea ecuației este cea mai importantă sarcină a teoriei benzilor energetice. Ea nu poate fi rezolvată matematic, deoarece nr. variabilelor este foarte mare  $\mathbf{N} \cdot \mathbf{3(z+1)}$ ,  
 $\mathbf{N}$  – nr. atomilor într-o unitate de volum  $V \sim 10^{23} (1 \text{ cm}^3)$ ,  
 $\mathbf{z}$  – nr. de  $\bar{e}$  într-un atom.

Ec. (sus) se rezolvă prin diferite metode de aproximare :

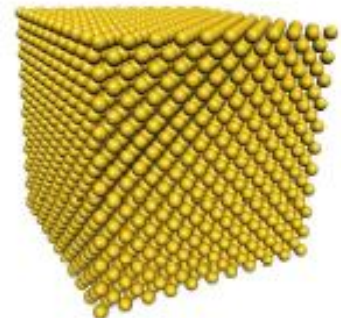
**Metoda I (adiabatică)** Conform acestei aproximări schimbul de  $E$  dintre  $\bar{e}$  și nuclee atomice nu există. Nucleele atomice se consideră fixe, dar  $\bar{e}$  se mișcă în jurul lor, datorită acestei aproximări, nucleele sunt înlăturate din ec. (sus) , dar problema rămîne cu un nr. foarte mare de  $\bar{e}$ . De aceea aproximarea a doua:

**II Aproximare unielectronică** → interacțiunea  $\bar{e}_i$  cu cristalul se prezintă ca interacțiunea cu un câmp efectiv creat de restul  $\bar{e}$  și nucleelor , și ca rezultat , ec. Schrödinger devine unielectronică și are forma:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m_n} \Delta_i + V(\vec{r}_s) \right) \Psi(\vec{r}_i) = E_i \Psi(\vec{r}_i)$$

$m_n$  – masa efectivă a  $\bar{e}$  ,  $V$  – energia potential a  $\bar{e}$  ,

$E_i$  – energia totală a  $\bar{e}$ .



Pentru soluționarea ec. (5.8.2) se folosesc 2 aproximări:  
**aproximarea  $\bar{e}$ -lor strâns legați** și **aproximarea  $\bar{e}$ -lor slab legați**.

**1) Aprox.  $\bar{e}$ -lor strâns legați:**  $V_A \gg \Delta V(\vec{r})$

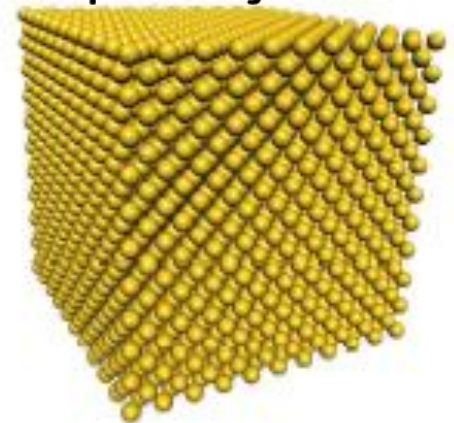
$V(\vec{r}) = V_A + \Delta V(\vec{r})$  (5.8.3) ,  $V_A$  – energia  $\bar{e}$  într-un atom izolat

$\bar{e}$  e strâns legat cu structura cubică simplă din Ec. Schrödinger unielectronică obținută pentru  $\bar{e}$ :

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_A + \mathbf{C} + 2\mathbf{A}(\mathbf{cos}k_x\mathbf{a} + \mathbf{cos}k_y\mathbf{a} + \mathbf{cos}k_z\mathbf{a}) \quad (5.8.4)$$

$E_A \rightarrow$  energia  $\bar{e}$  în atom izolat

$C \rightarrow$  este determinat de gradul de influență a atomilor vecini  
 $\int$  de schimb, valoarea ei depinde de gradul de suprafață a învelișurilor electronice.



Din această aproximare pot fi obținute diagramele:

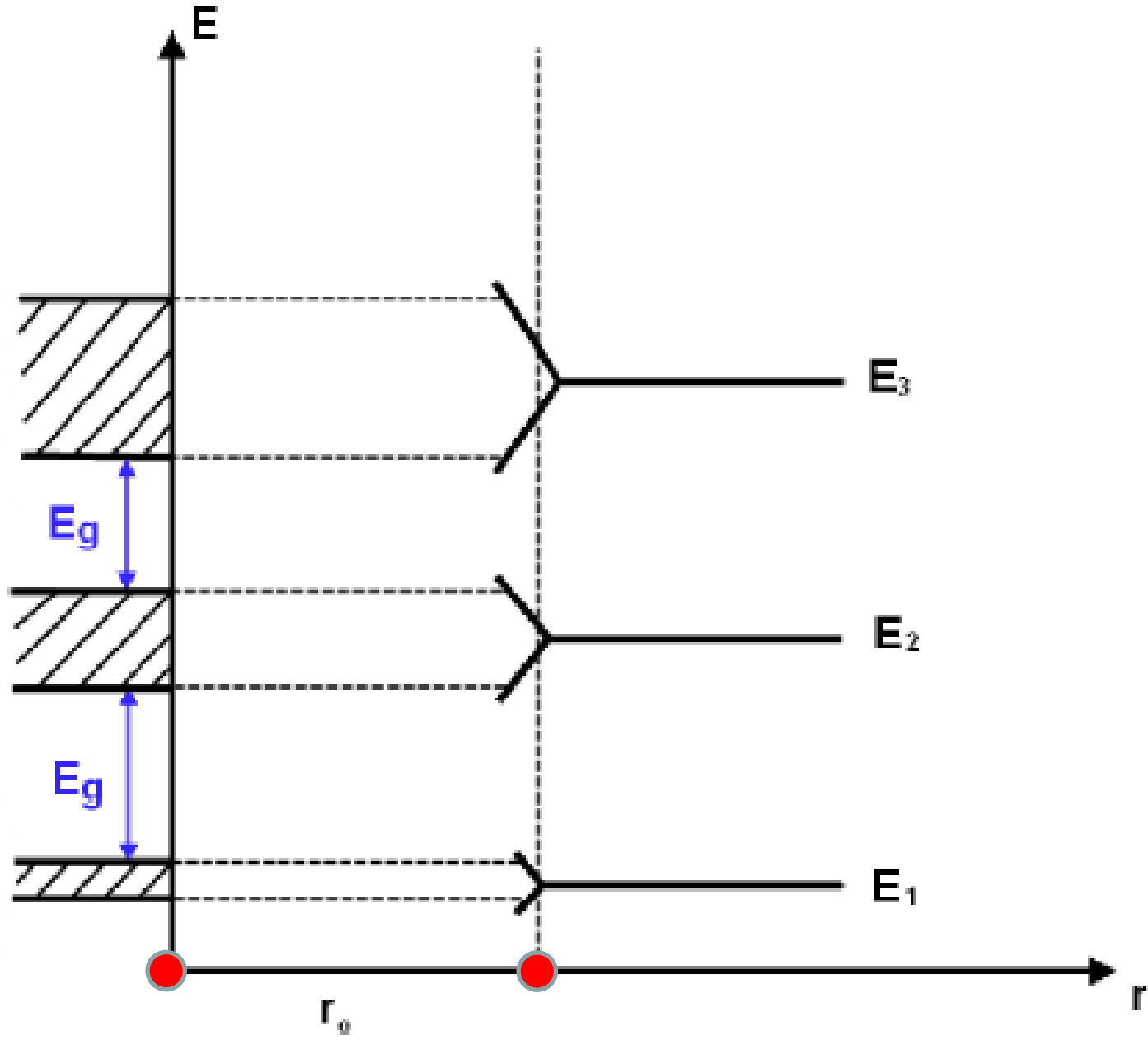


Fig. 5.12

Lăţimea benzilor permise creşte cu creşterea energiei, iar lăţimea benzilor interzise se micşorează (fig. 5.12).

1) **Metoda aprox.  $\bar{e}$ -lor slab legaţi** – la aplicarea ei se consideră că  $E_c$  a  $\bar{e}$ -lor  $\gg E_v$  ( $\bar{e}$  sunt aproape liberi).

Deci rezultă  $E = f(k)$ , seaman cu o parabolă.

Prezentăm  $E = f(k)$  pentru această metodă:

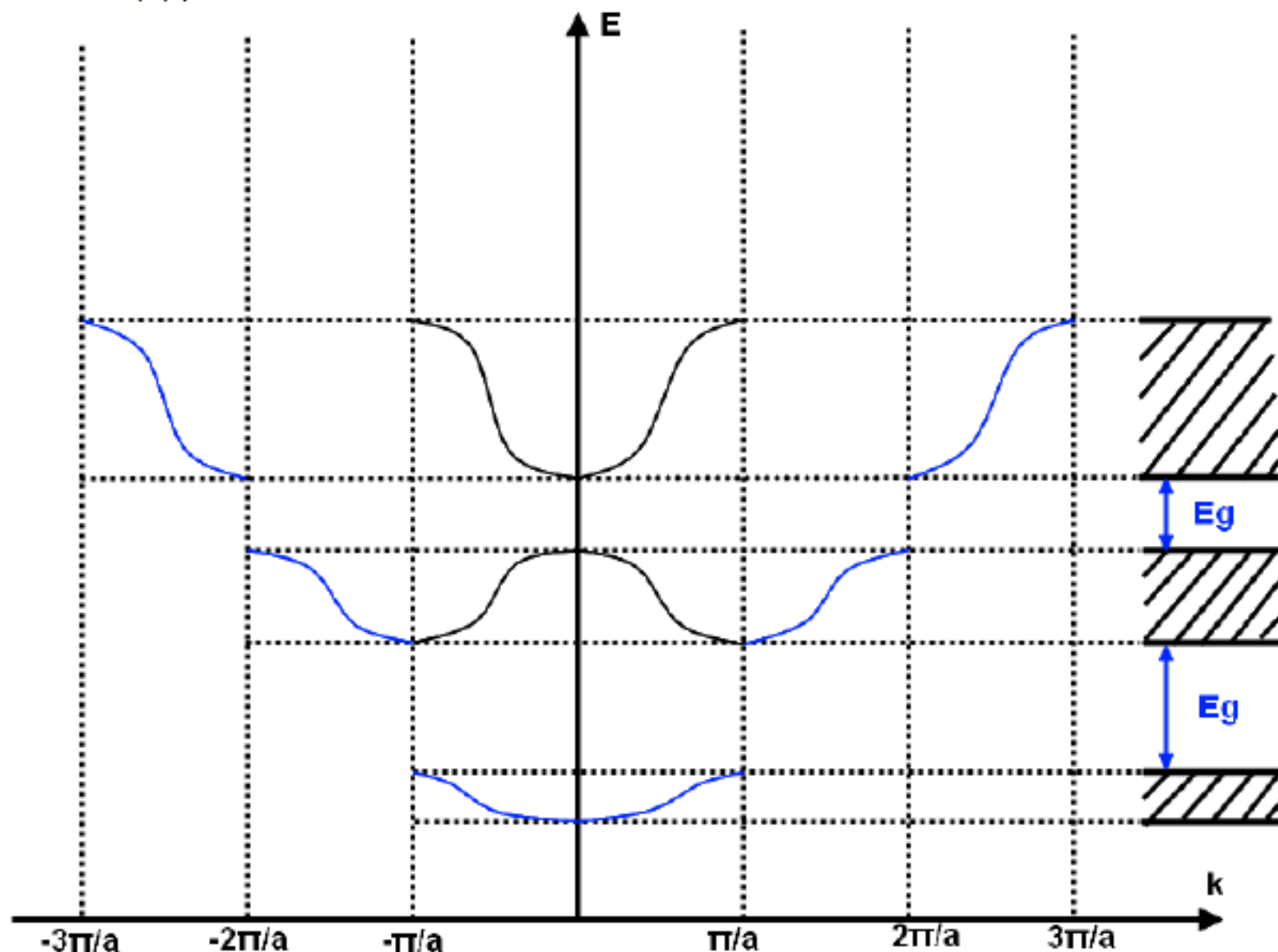


Fig. 5.13 Zona Brillouin redusă

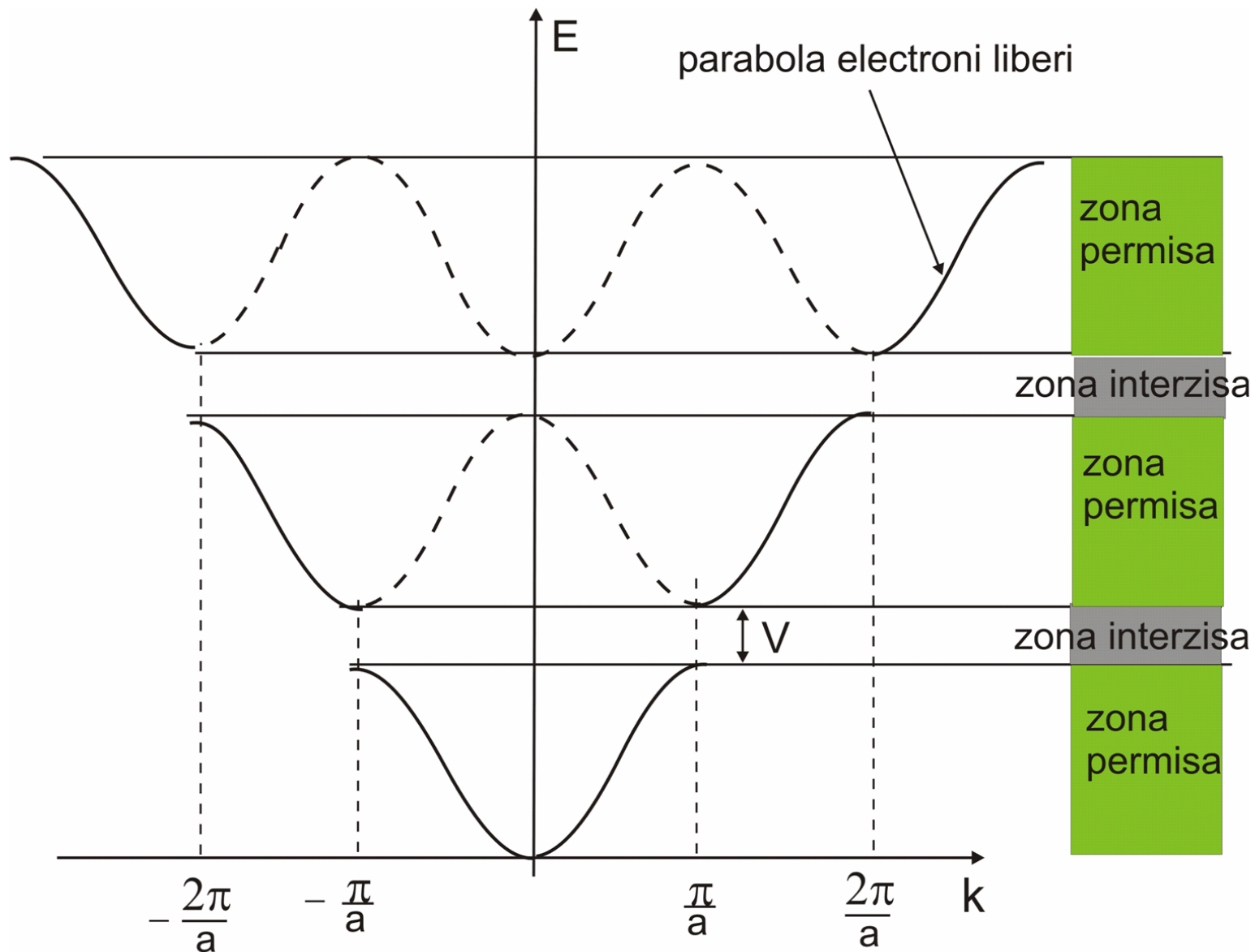
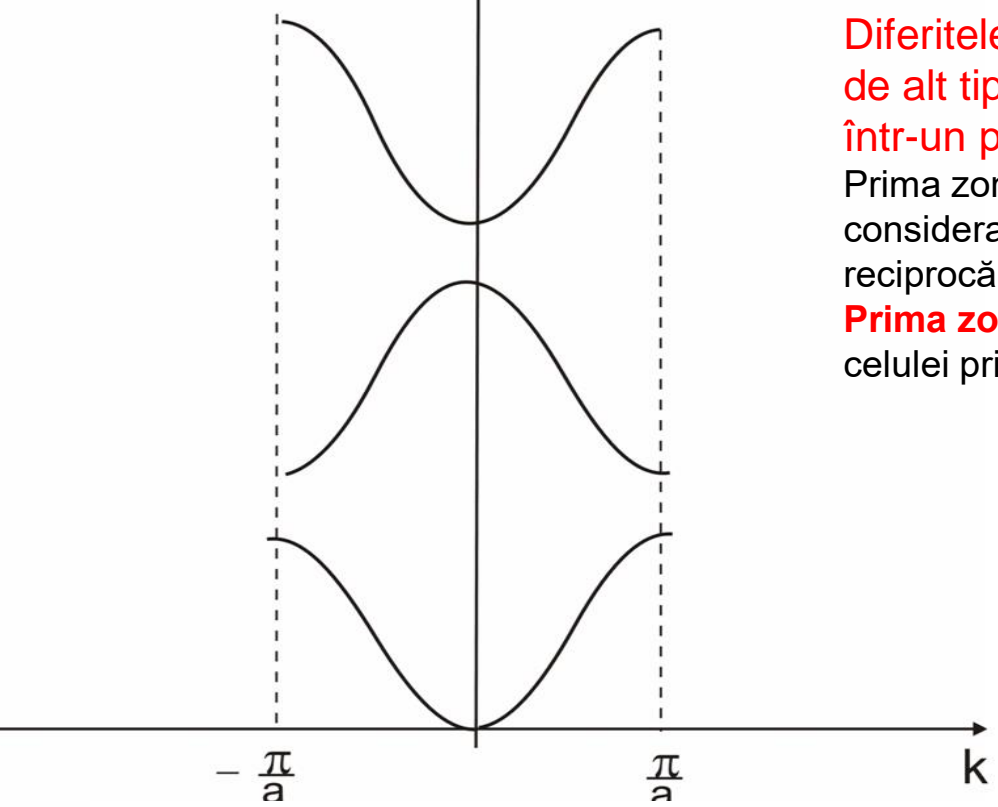


Fig.10.4. Dependenta energiei de vectorul de unda  $k$  in aproximatia electronului cvasiliber. Pentru  $k = n\pi/a$ , in spectrul energetic al electronului apar benzi de energie interzise. Astfel, spectrul energetic contine o succesiune de benzi permise separate intre ele de benzi interzise.

**Zona Brillouin** – un interval al domeniului lui  $k$  (nr. de undă) în care el se schimbă continuu, iar la granițele acestui interval valorile lui  $k$  sunt interzise.

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (2), \quad \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{n\pi}{a} \quad \Rightarrow \quad \lambda n = 2a \quad (5.8.5)$$



**Zonele Brillouin** și importanța lor:  
 Diferitele zone Brillouin corespund celulelor primitive de alt tip care apar în teoria nivelurilor electronice într-un potențial periodic.

Prima zonă Brillouin este considerată celula primitivă Wigner-Seitz (WS) din rețeaua reciprocă. Cu alte cuvinte,

**Prima zonă Brillouin** este o construcție geometrică a celulei primitive WS în spațiul  $k$ .

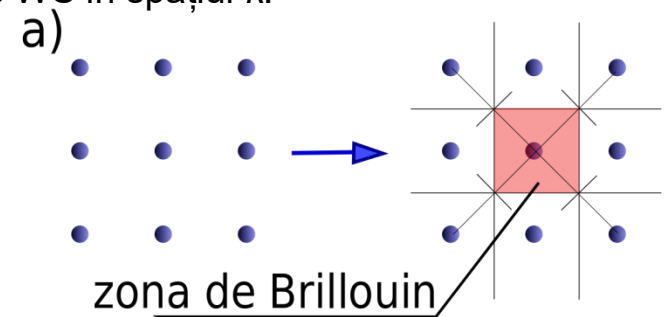
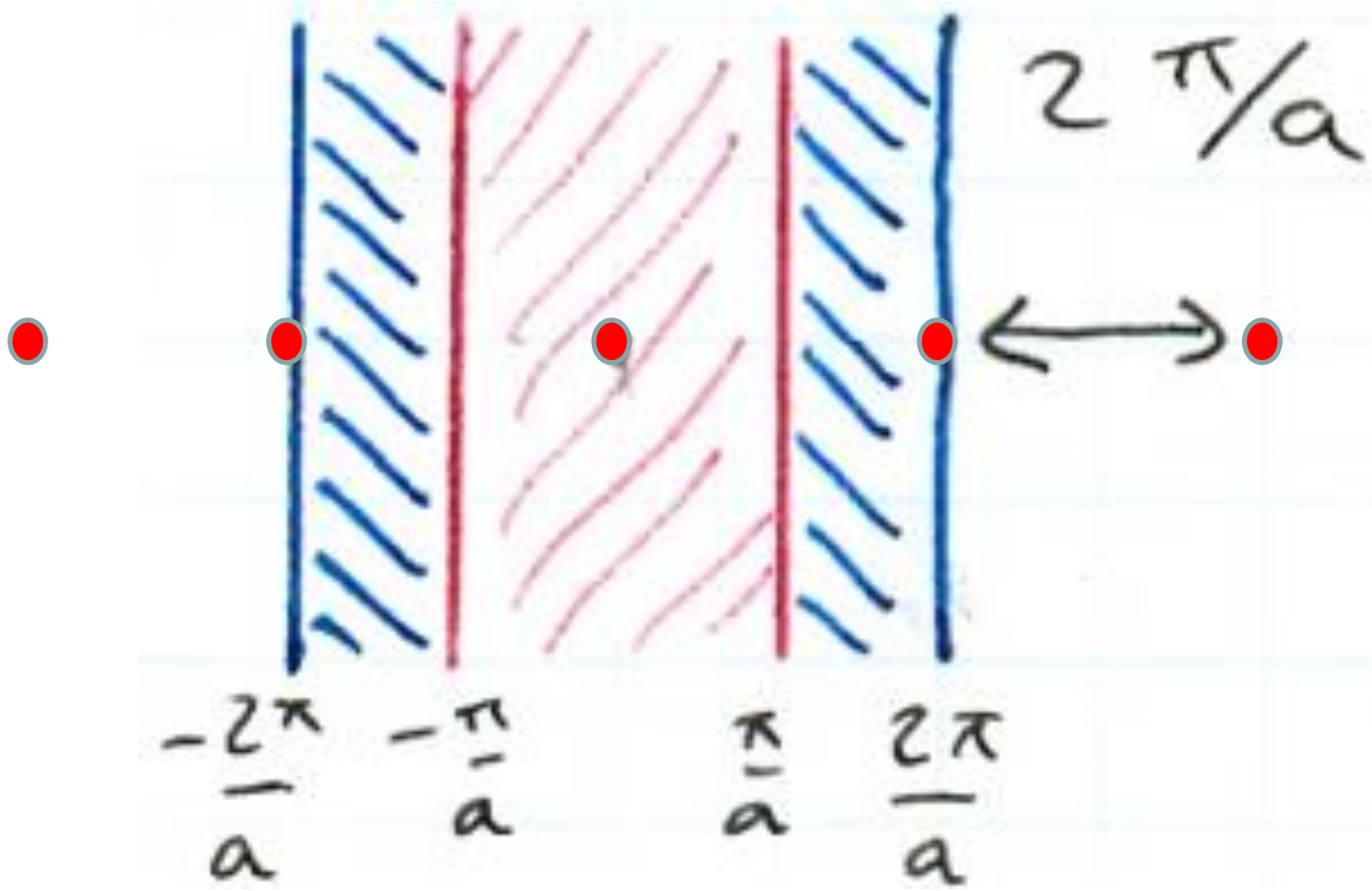
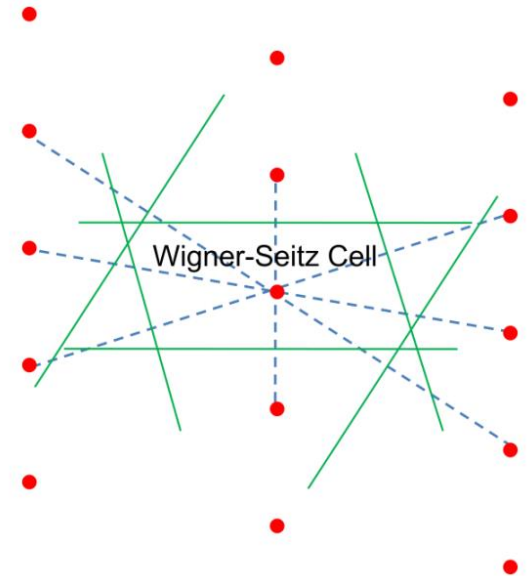
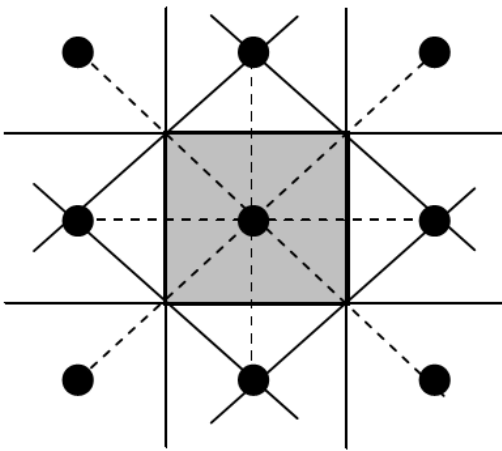
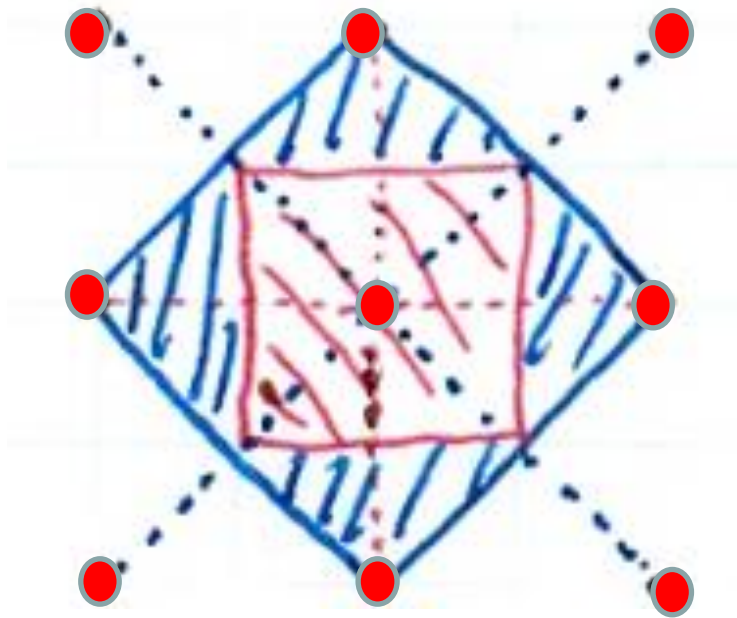


Fig.10.5. Dependentă energiei de  $k$  în prima zonă Brillouin pentru primele trei benzi de energie permisă.

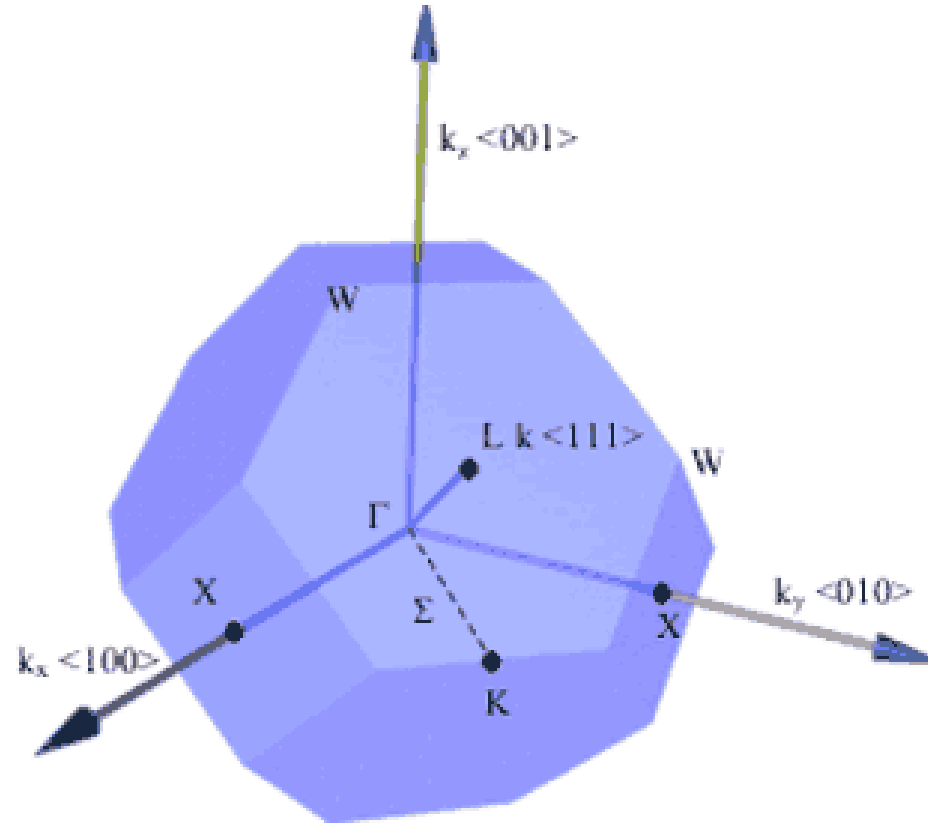






d) The Wigner-Seitz cell is identified as the innermost region bounded by the perpendicular bisectors. It is shown in the figure as the shaded region.

# Zona Brillouin a Siliciului

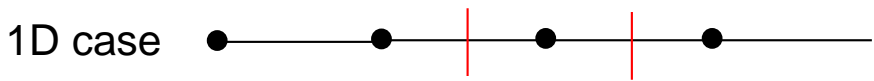


Punctele de înaltă simetrie pe zona Brillouin au importanță specifică. Cel mai important punct pentru dispozitivele optoelectronice este centrul la  $k = 0$ , cunoscut sub numele de punct gamma  $\Gamma$ . Rețineți punctele  $\Gamma$ ,  $X$ ,  $W$ ,  $K$ , ...

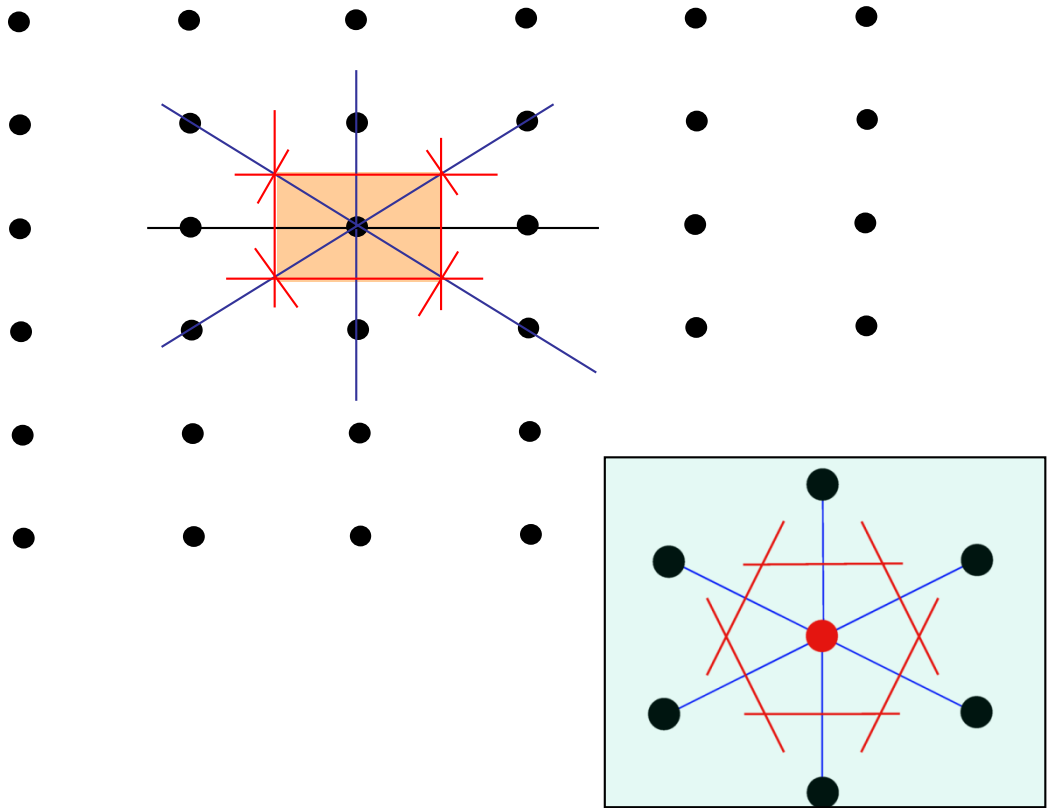
# • Celula unitară primitivă Wigner-Seitz și prima zonă Brillouin

Celula Wigner-Seitz în jurul unui punct al rețelei este definită ca locusul punctelor din spațiu care sunt mai aproape de acel punct al rețelei decât de oricare dintre celelalte puncte ale rețelei cristaline.

Celula poate fi aleasă mai întâi prin selectarea un punct al rețelei. Apoi, liniile sunt desenate către toate punctele din apropiere a rețelei (cele mai apropiate). La punctul mediu al fiecărei linii, o altă linie (sau un plan, în 3D) este desenată normal pentru fiecare prim set de linii.

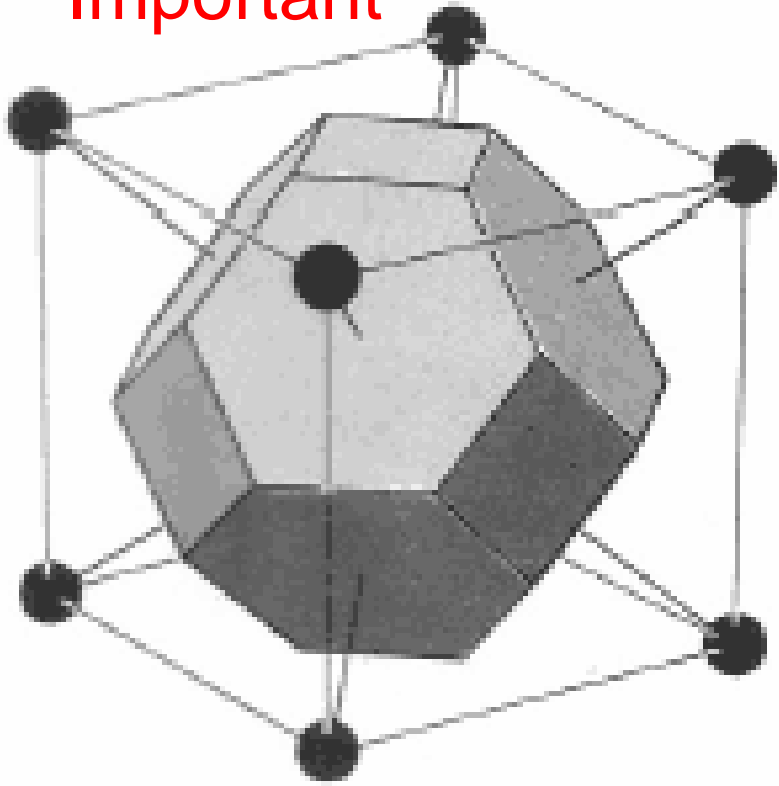


2D case



3D case: BCC

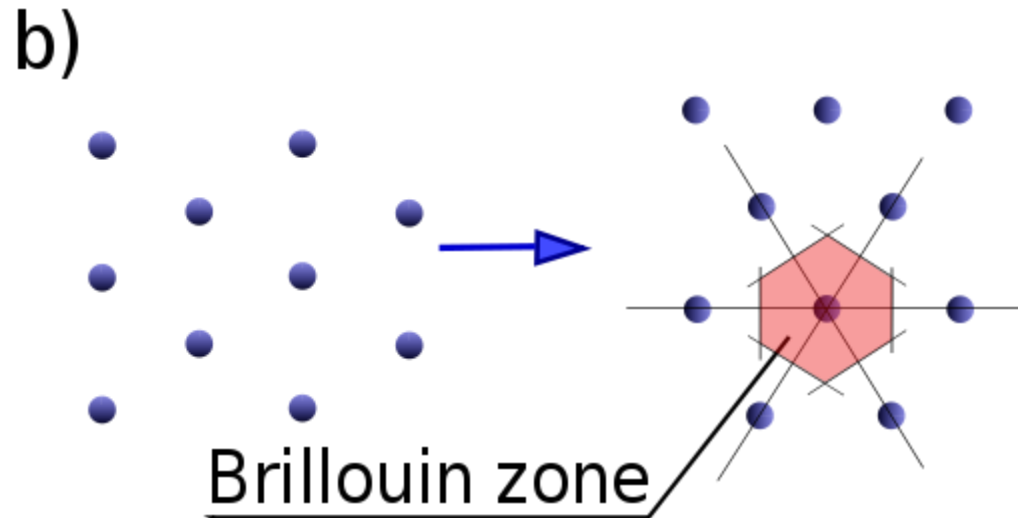
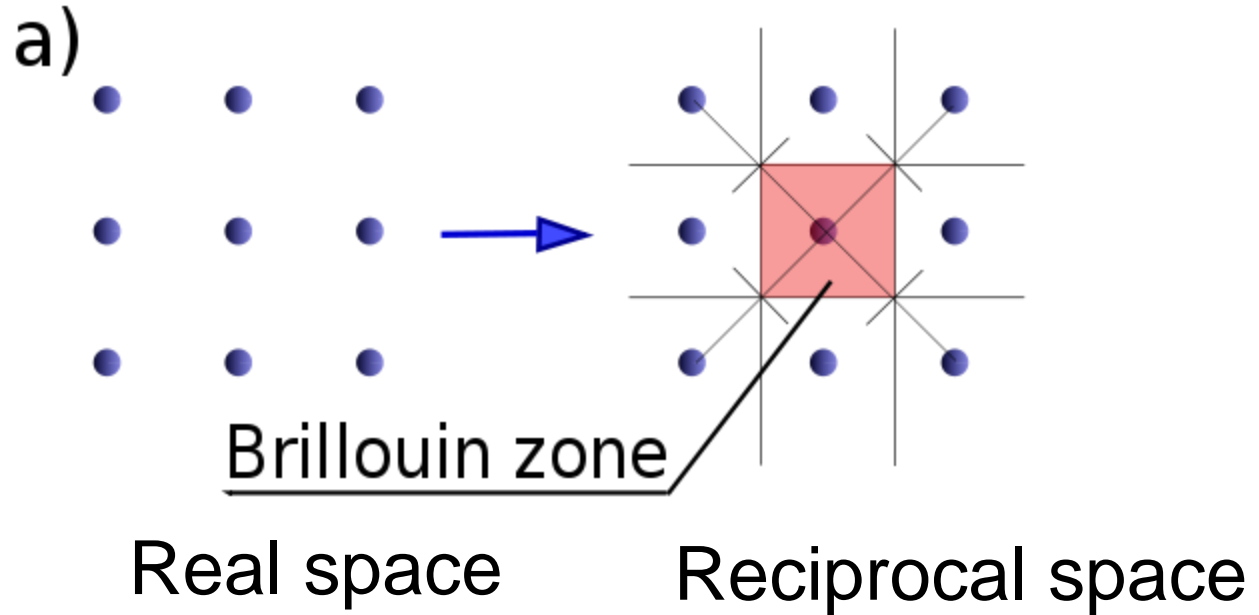
**Important**



The first Brillouin zone is the Wigner-Seitz cell of the reciprocal lattice

1D

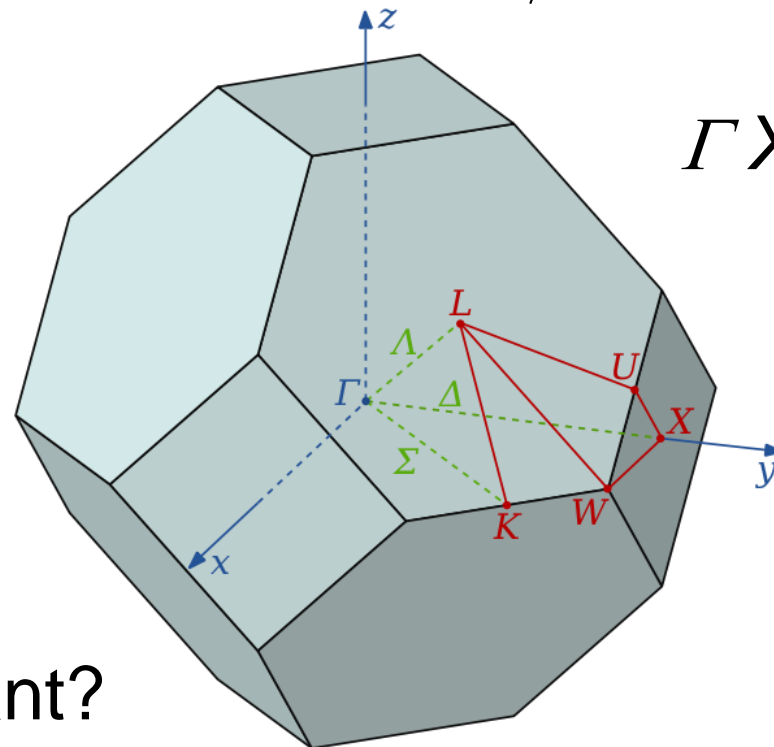
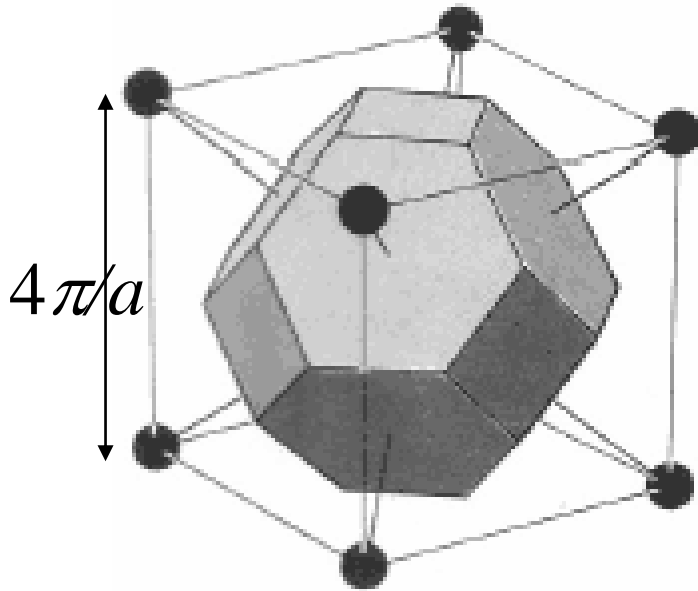
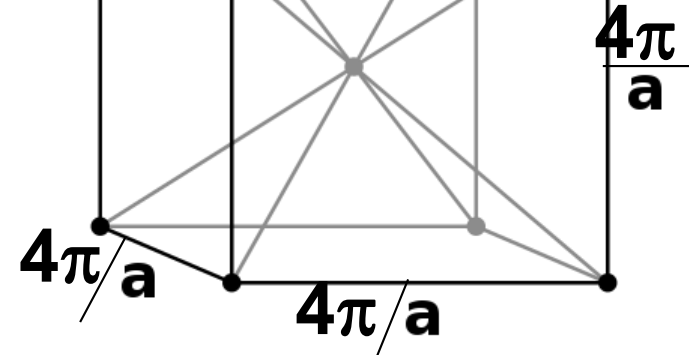
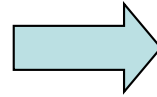
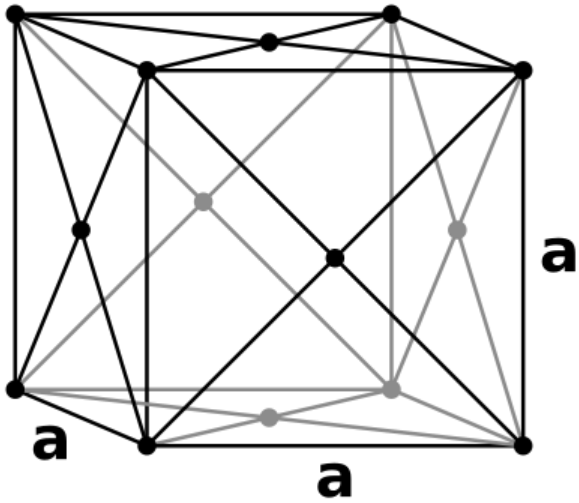
2D



Note: this figure is updated.

3D:

Recall that the reciprocal lattice of FCC is BCC.

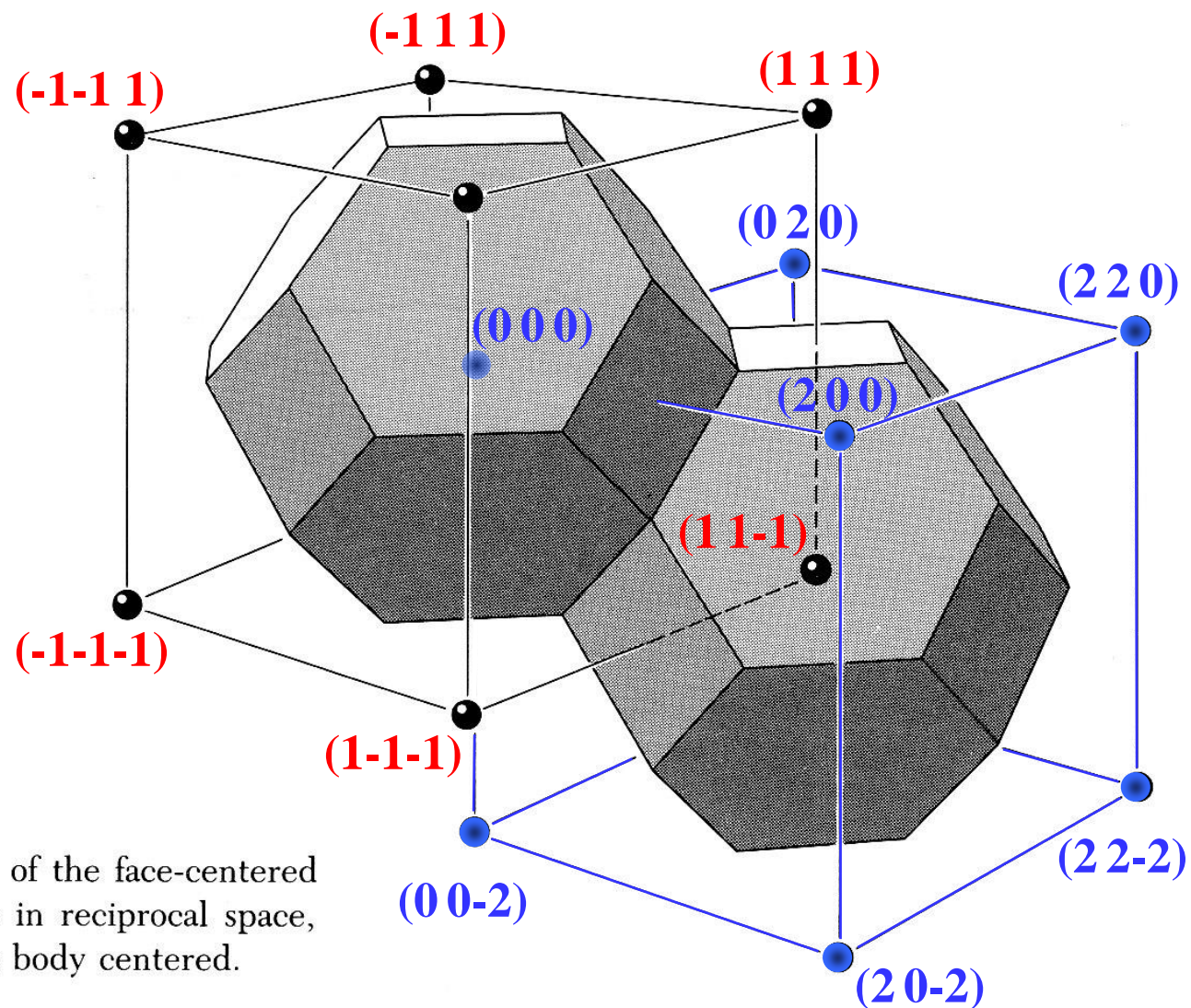


$\Gamma X = ???$

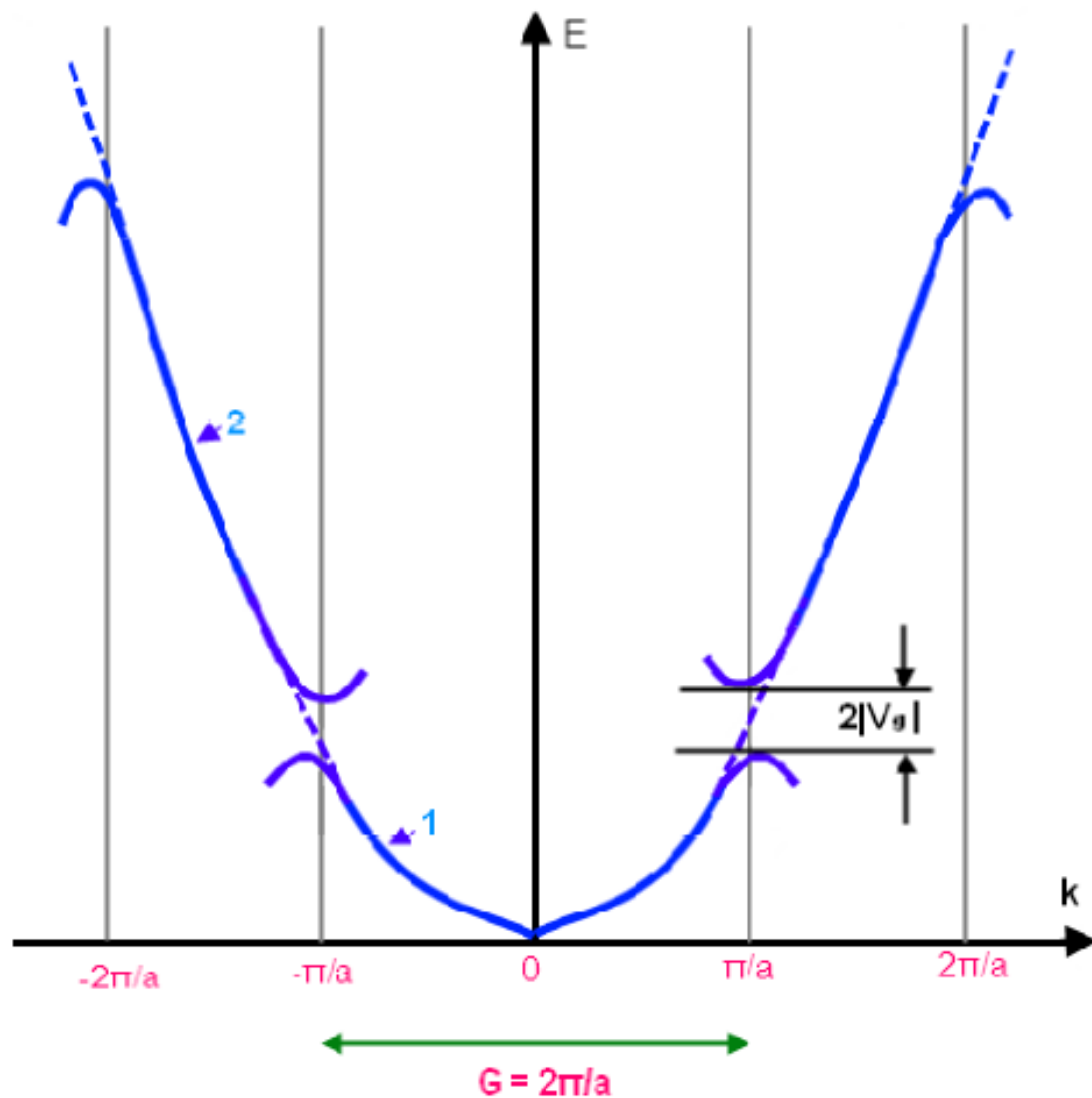
Why is FCC so important?

## Zonele exterioare Brillouin

Spațiul reciproc poate fi complet umplut cu zonele Brillouin care sunt mutate din zona Brillouin centrală prin vectorii rețelei reciproce  $\mathbf{G}_{hkl}$ .



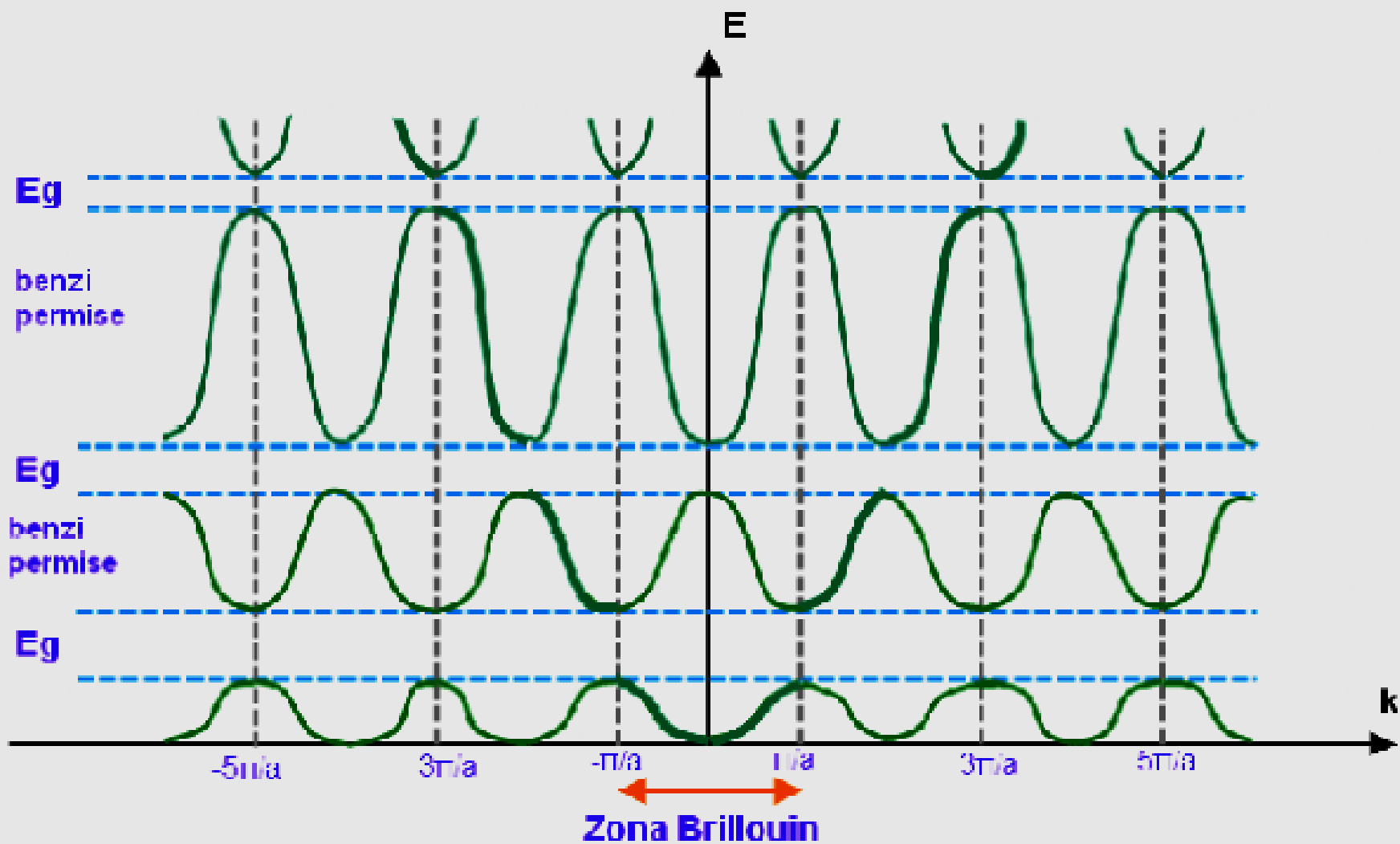
**Figure 15** Brillouin zones of the face-centered cubic lattice. The cells are in reciprocal space, and the reciprocal lattice is body centered.



**Fig. 5.14**

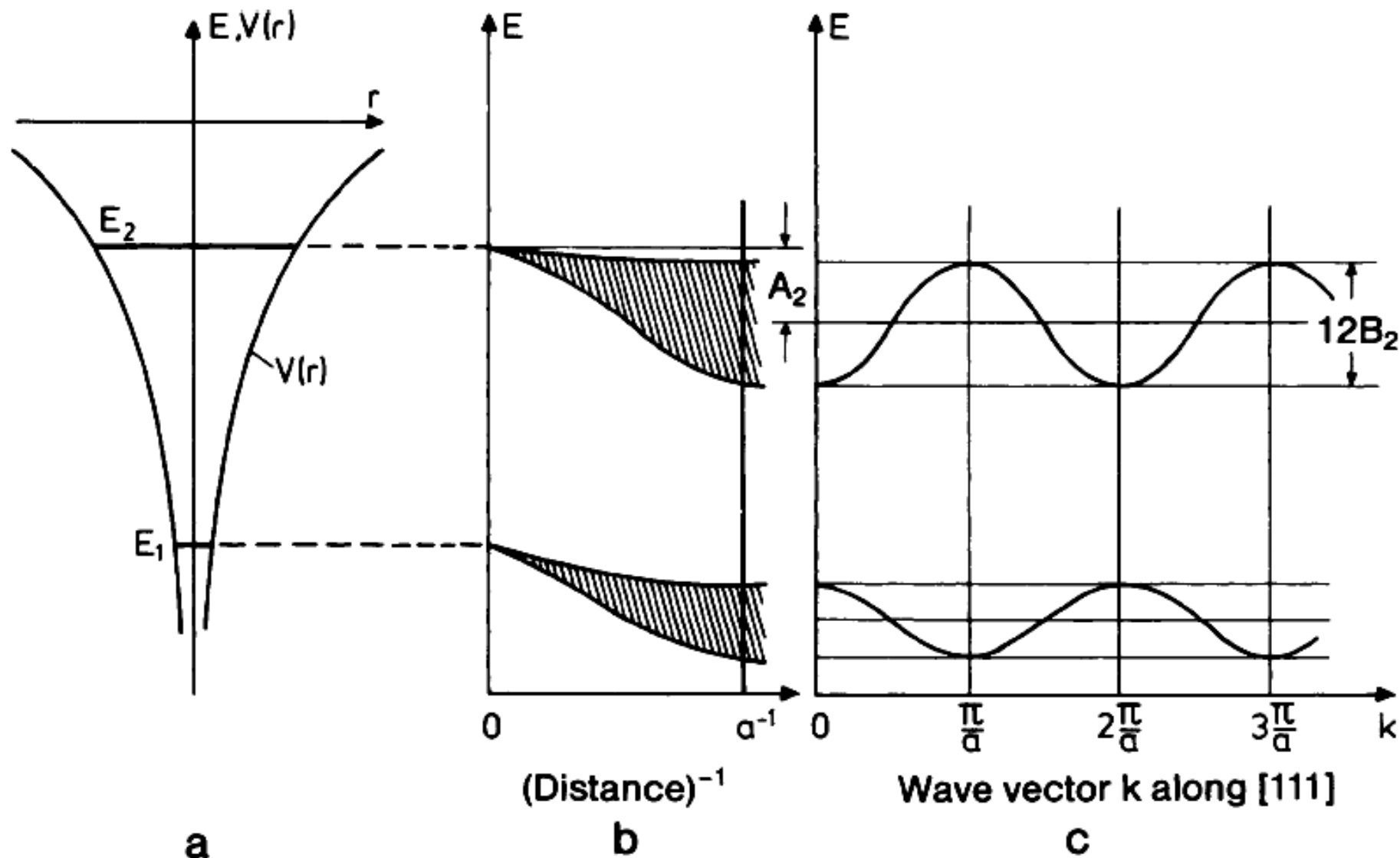
Scendarea parabolii energiei  $\epsilon$  liber (---) la capetele primei zone Brillouin  $k = \pm \pi/a$  – în cazul unidimensional. În prima aproximare banda interzisă este dată de către dublu coeficientul Fourier ( $2V_0$ ) al potențialului. Continuarea periodică pe întreg spațiu  $k$  de creștere a 2 benzi continue (1) și (2), care sunt prezentate aici în vecinătate cu parabola originală a energiei. Dispersia energiei  $E = f(k)$  pentru cazul unidimensional:





**Fig. 5.15**

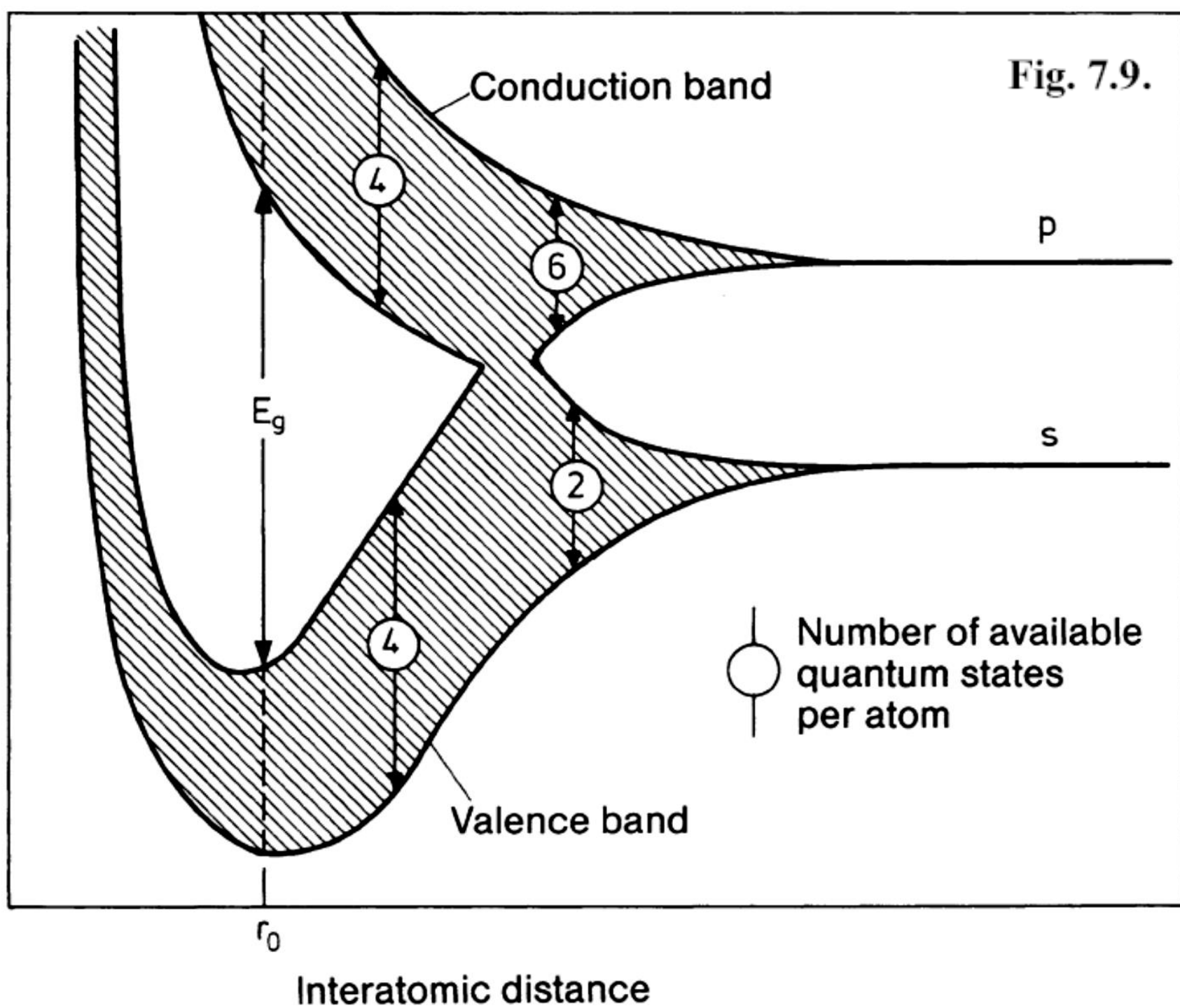
Curbele  $E=f(k)$  a dispersiei energiei pentru rețeaua unidimensională ( $a$  – constanta rețelei) în schema yonei extinse. După cum se observă aprox.  $\tilde{e}$  quasi liberi dau o creștere a regiunelor energiei lor permise și interzise datorită deschiderii rupturilor în benzi. Părțile benzilor corespunzătoare parabolei  $\tilde{e}$  liber sunt indicate cu linii mai groase.



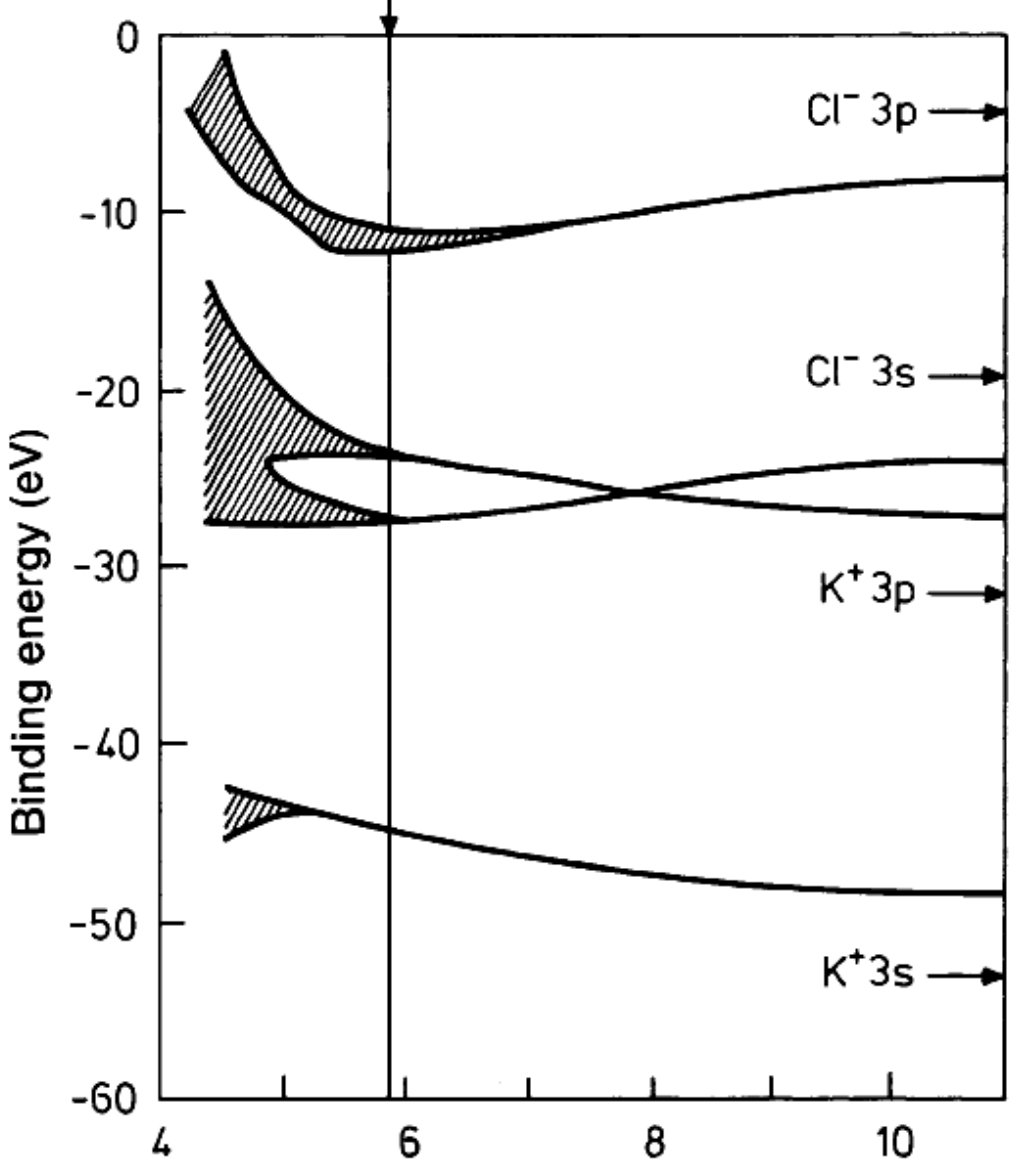
**Fig. 7.8 a-c.** Qualitative illustration of the result of a tight-binding calculation for a primitive cubic lattice with lattice constant  $a$ . (a) Position of the energy levels  $E_1$  and  $E_2$  in the potential  $V(r)$  of the free atom. (b) Reduction and broadening of the levels  $E_1$  and  $E_2$  as a function of the reciprocal atomic separation  $r^{-1}$ . At the equilibrium separation  $a$  the mean energy decrease is  $A$  and the width of the band is  $12B$ . (c) Dependence of the one-electron energy  $E$  on the wave vector  $k(1, 1, 1)$  in the direction of the main diagonal  $[111]$

Fig. 7.9.

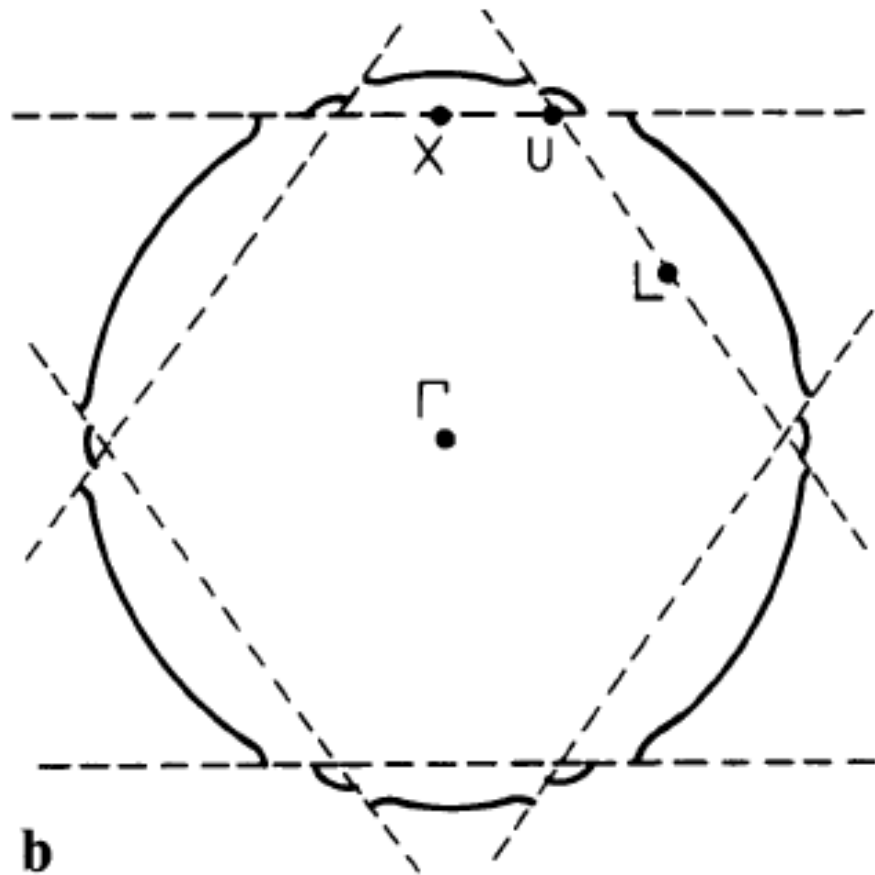
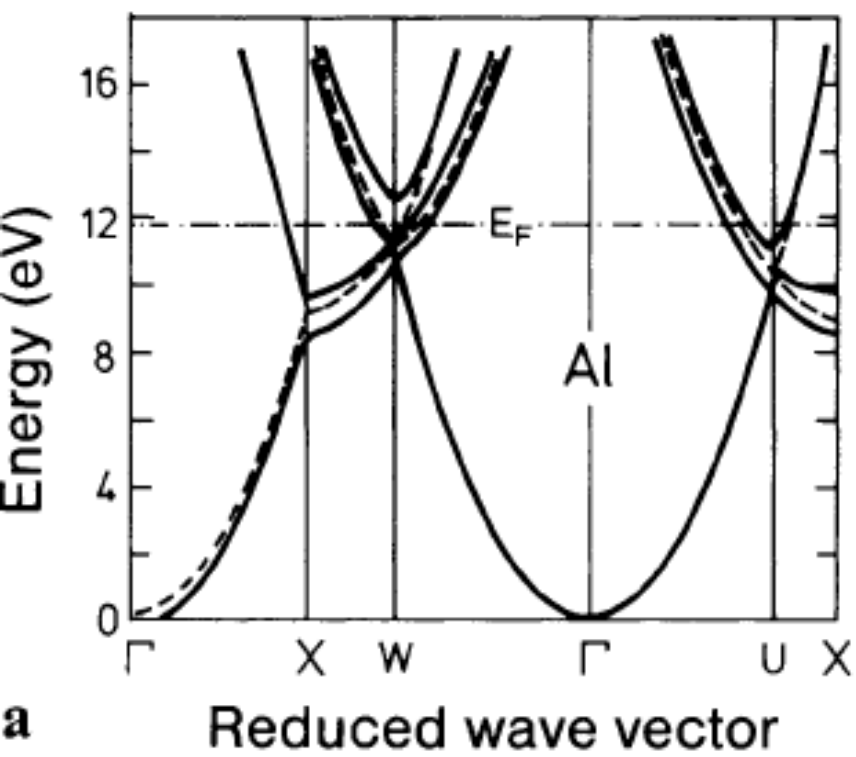
Electron energy

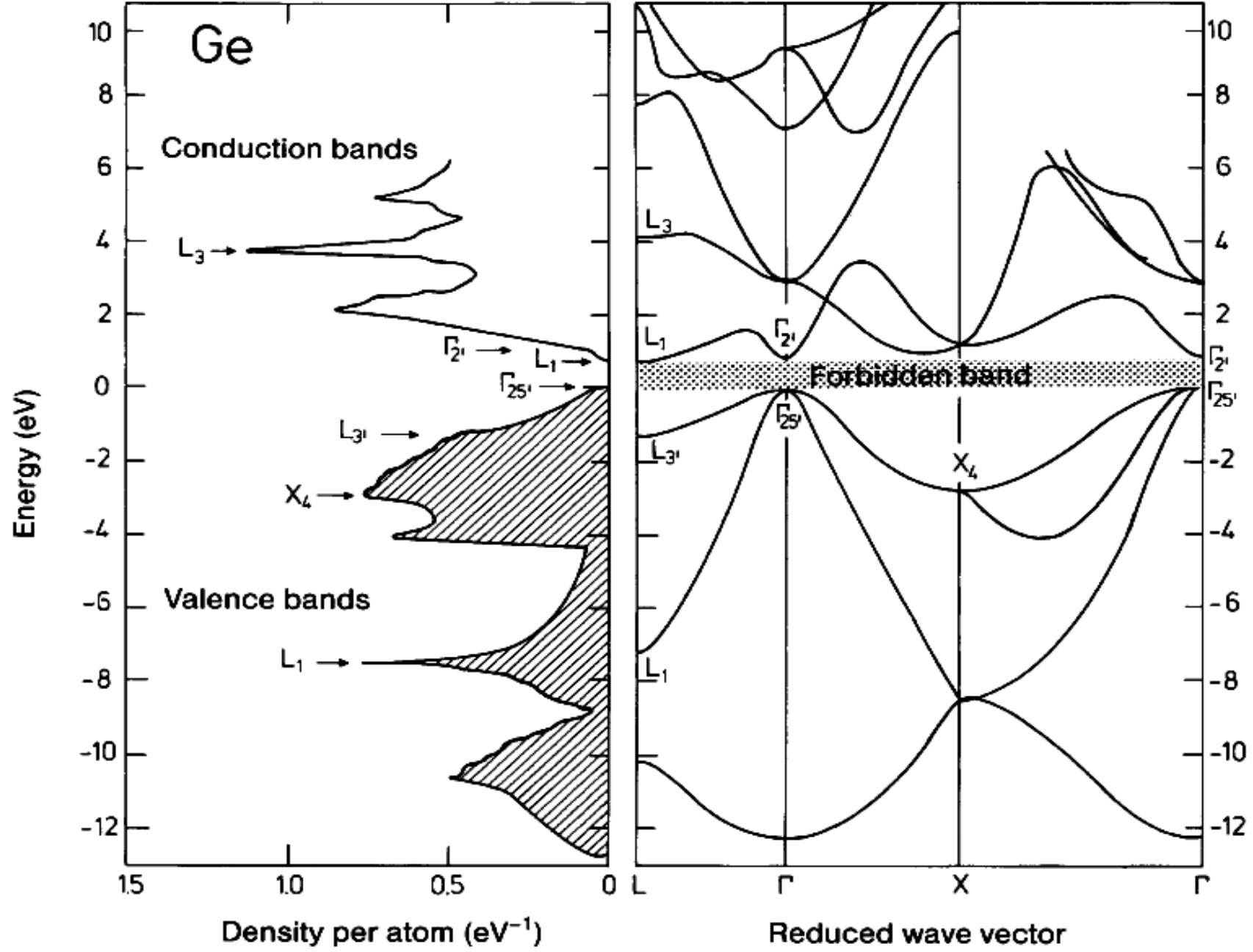


Equilibrium separation



Ion separation in Bohr radii

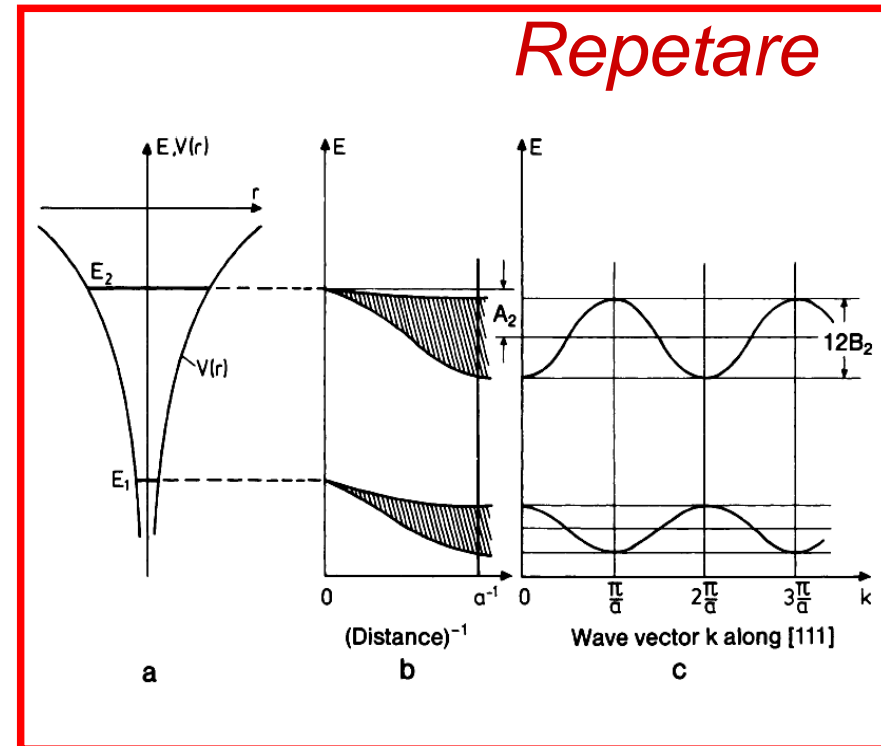




**§ Corpuri solide, conductoare, semiconductoare,  
izolatoare**

# § Corpuri solide:

conductoare,  
semiconductoare,  
izolatoare





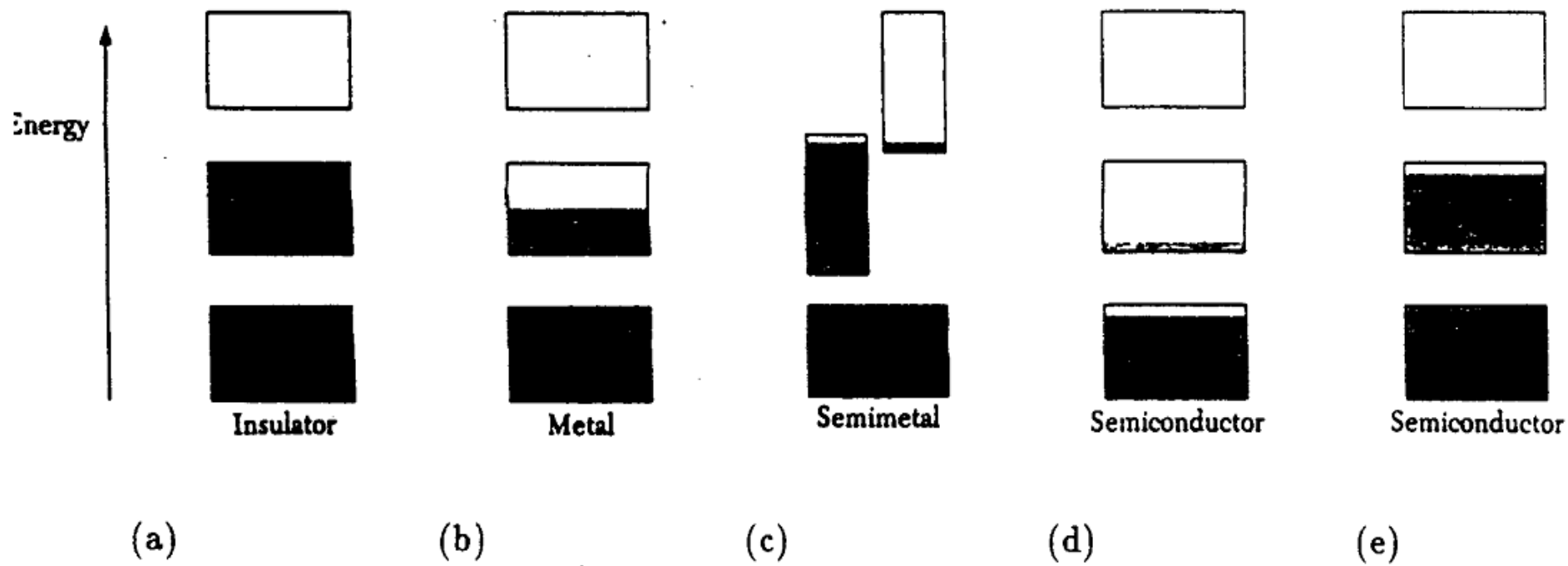


Figure 2.1: Schematic electron occupancy of allowed energy bands for an insulator, metal, semimetal and semiconductor. The vertical extent of the boxes indicates the allowed energy regions: the shaded areas indicate the regions filled with electrons. In a semimetal (such as bismuth) one band is almost filled and another band is nearly empty at a temperature of absolute zero. A pure semiconductor (such as silicon) becomes an insulator at  $T = 0$ . Panel (d) shows an intrinsic semiconductor at a finite temperature, with carriers that are thermally excited. Panel (e) shows a  $p$ -doped semiconductor that is electron-deficient, as, for example, because of the introduction of acceptor impurities.

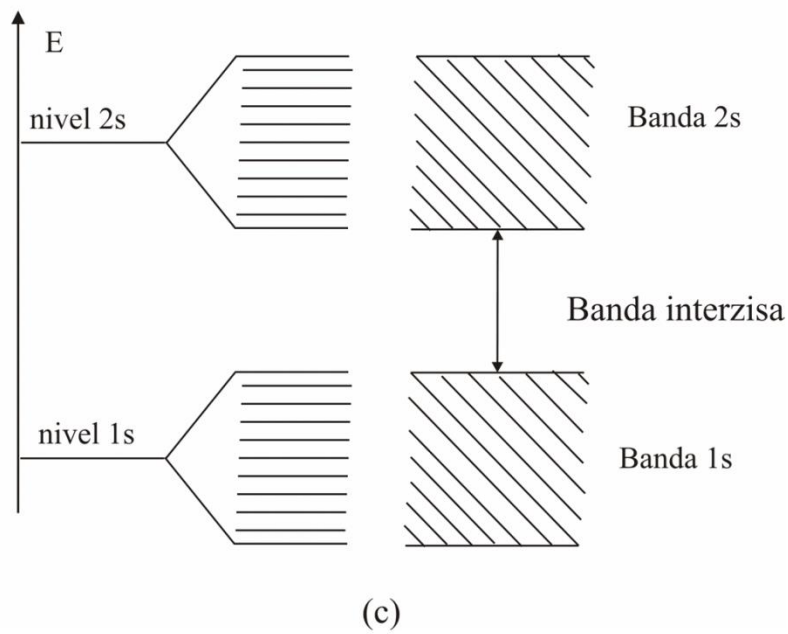
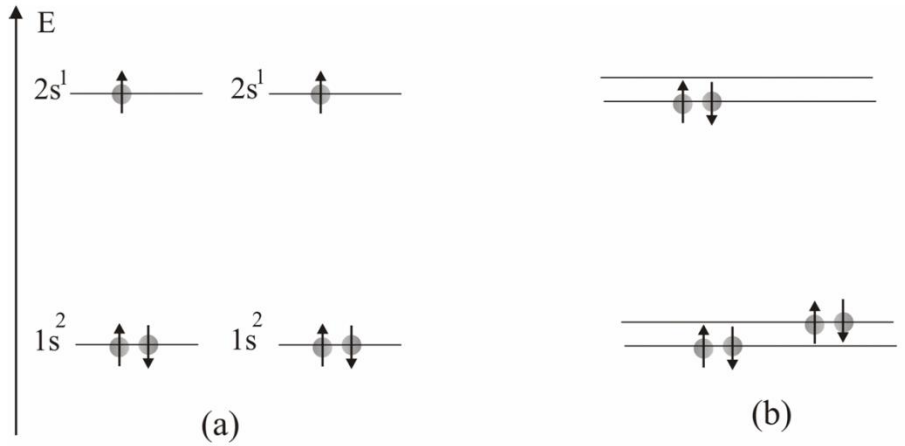
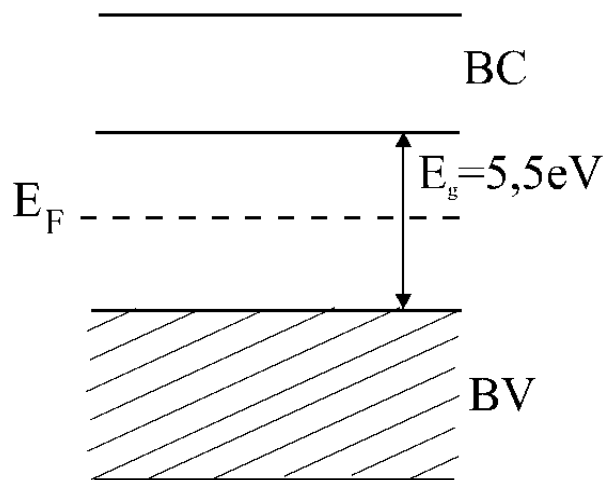


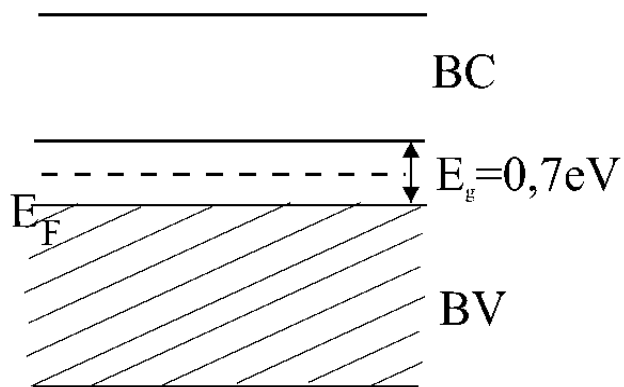
Fig.10.7. (a) nivelele atomice individuale, (b) despicierea nivelelor atomice de energie atunci cand atomii sunt apropiati si (c) formarea benzilor de energie intr-un cristal .

Izolator



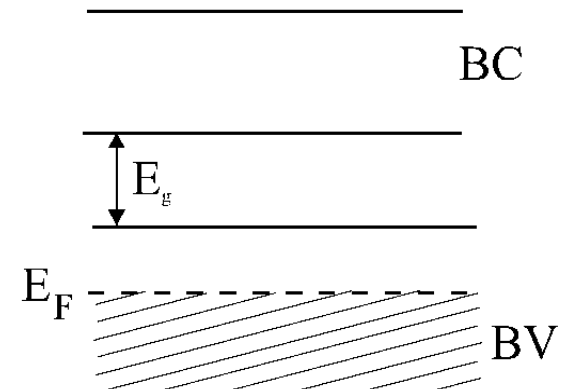
(a) Diamant

Semiconductor



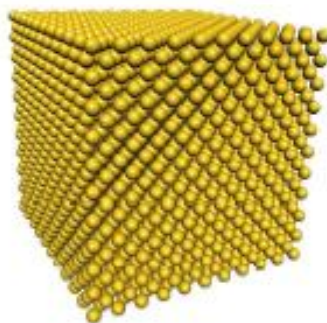
(b) Germaniu

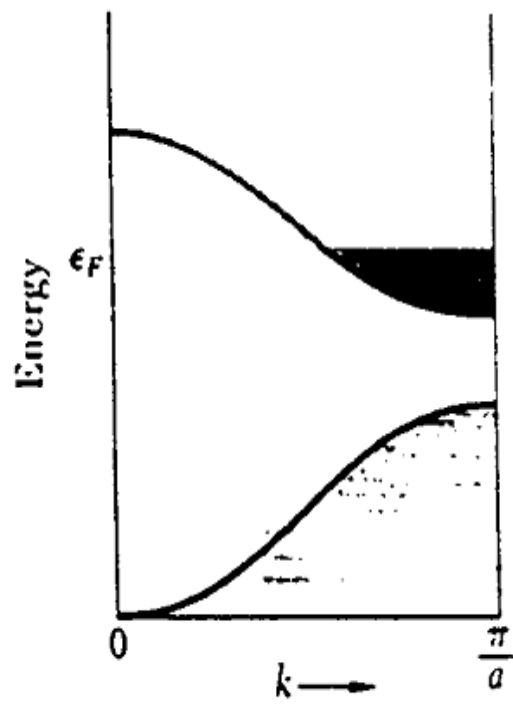
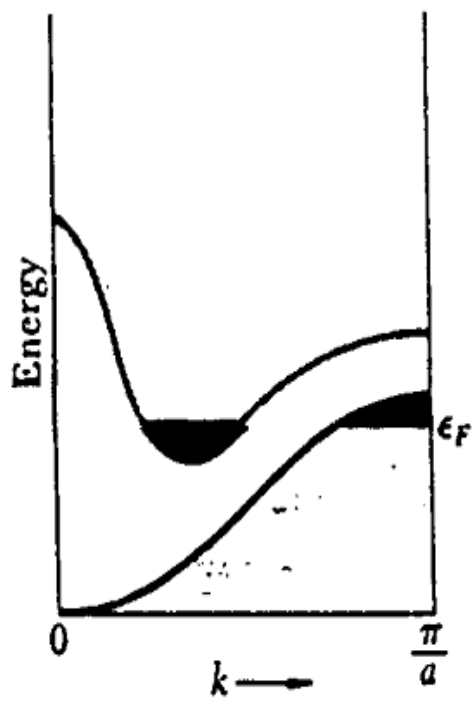
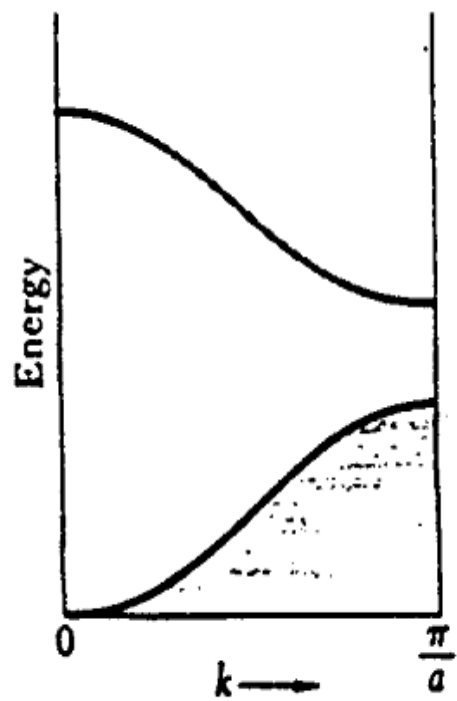
Metal

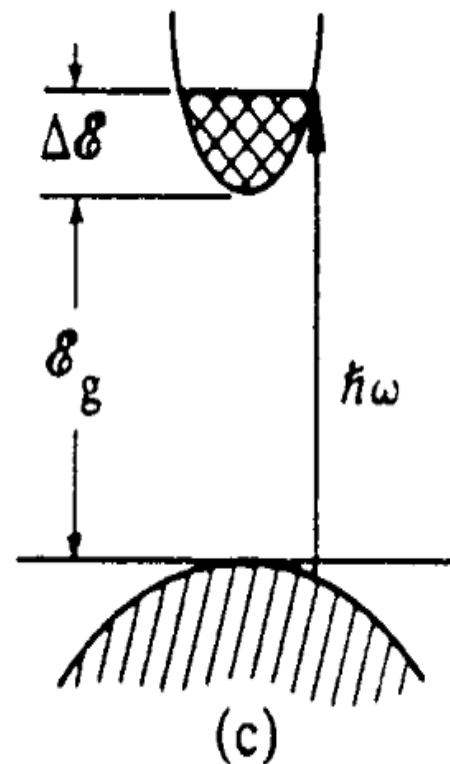
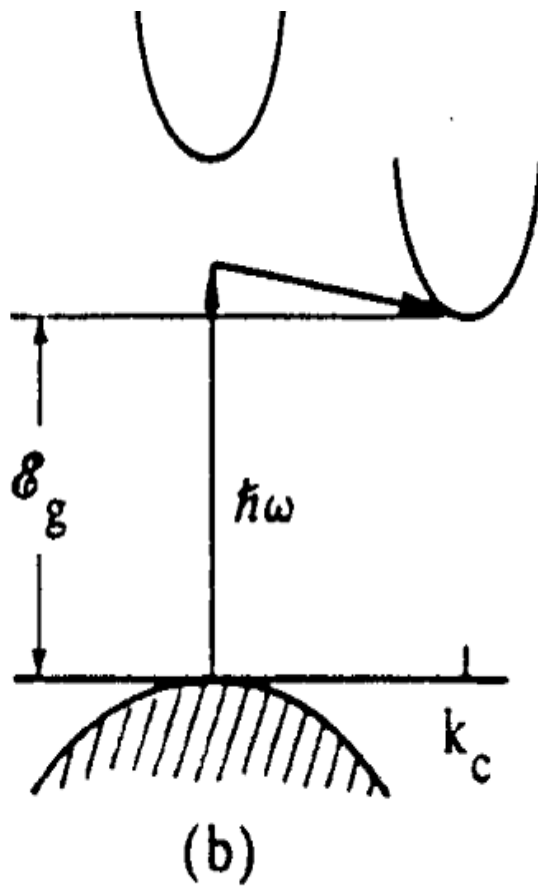
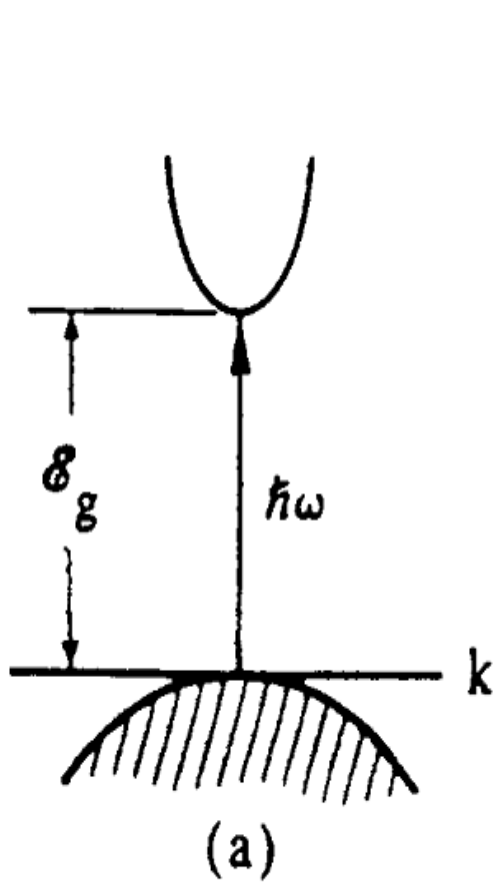


(c)

Fig.10.8. Structura de benzi pentru un (a) izolator, (b) semiconductor si (c) metal.







$$E_c - E_d \simeq 0.007\text{eV}$$

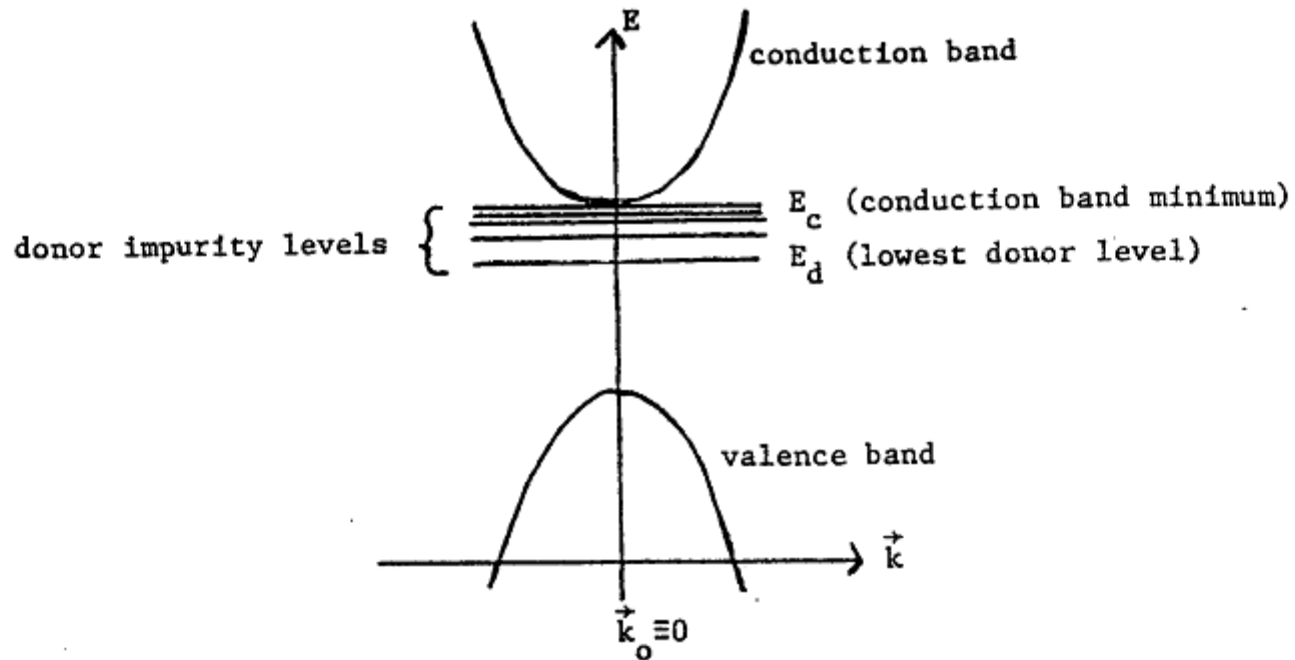


Figure 3.2: Schematic band diagram showing donor levels in a semiconductor.

$$E_n = \frac{e^2}{2n^2 a_0} = \frac{m e^4}{2n^2 \hbar^2} \qquad E_d = E_{\ell=1} = E_c - \frac{m^* e^4}{2\epsilon^2 \hbar^2}.$$

$$E_n(-i\vec{\nabla}) \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m_\ell^*} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\hbar^2}{2m_t^*} \left( \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)$$