

ESAME:
relazione di gruppo su dati presi in lab
+ esame orale individuale

Gruppi:

a seconda del numero totale di studenti si formeranno gruppi da 3 a 5 persone

ogni gruppo viene in lab dalle 14 alle 19.30 secondo un calendario prestabilito

la formazione dei gruppi e il calendario sta a voi

in genere ogni gruppo fa in lab approx 40-50 ore (7-10 pomeriggi)

Difetti del corso:

- Fate gli esperimenti prima di aver fatto per bene (in corsi appositi*) la teoria

*Corsi:

Fisica della materia I e II

Fisica delle nanostrutture

Introd. ai sistemi quantistici a molti corpi

Ma questo corso é per imparare a usare gli strumenti!
Non la teoria.

DIMENSIONI ED EFFETTI QUANTISTICI

Effetti quantistici cominciano a essere apprezzabili per esempio quando le dimensioni del sistema sono comparabili con la lunghezza d'onda di de Broglie*. Per un elettrone di energia dell'ordine di $k_B T$ ($T=300$ K)

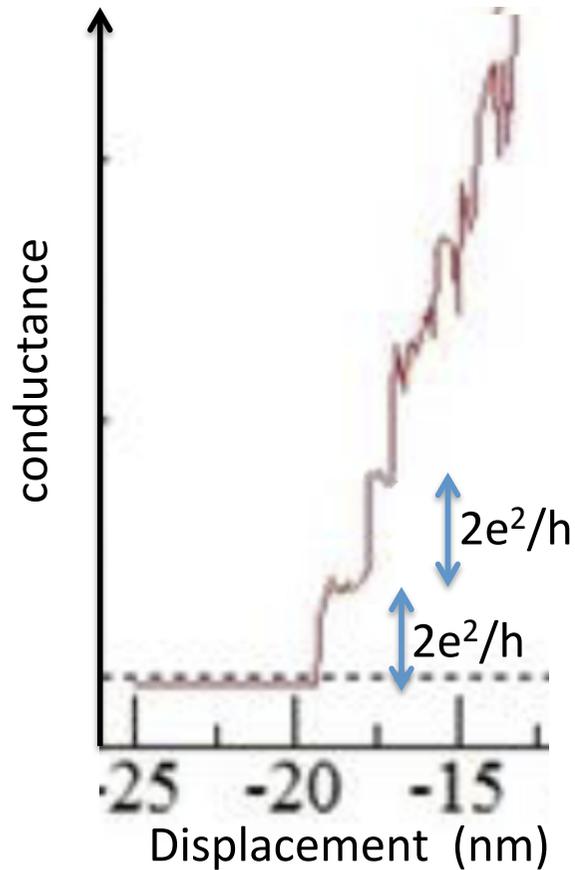
$$\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{h}{\sqrt{2Em}} \approx 10^{-8} \text{ m} \quad 10 \text{ nm}$$

In un solido, come vedremo, gli elettroni si comportano come se la loro massa fosse rinormalizzata, a volte anche di due o tre ordini di grandezza. Perciò a seconda dei casi gli effetti quantistici possono essere evidenti su scale più grandi o più piccole di 10 nm.

In genere sono sempre più evidenti nel limite $T \rightarrow 0$.

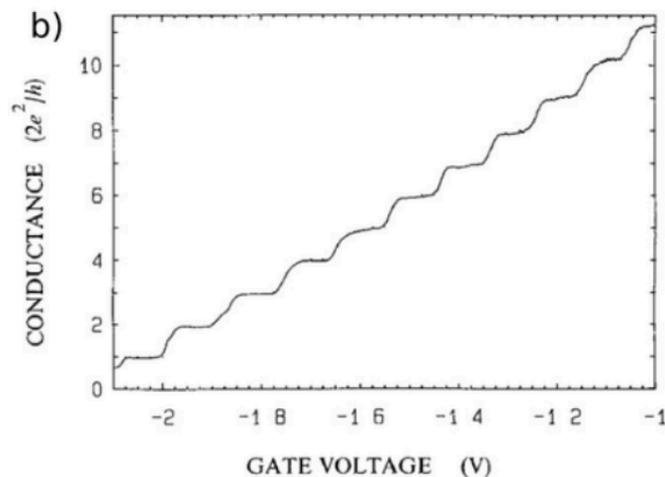
Ad esempio la quantizzazione della conduttanza si vede anche a temperatura ambiente se un nanofilo o un nanocontatto metallico ha uno spessore di un atomo o pochi atomi, e' visibile solo a basse temperature (pochi kelvin) se un nanofilo o un nanocontatto in un semiconduttore ha spessore dell'ordine del micron .

* e se non si ha decoerenza



Conduzzanza di un nanofilo d'oro misurata da vostri colleghi a temperatura ambiente. I valori multipli di $2e^2/h$ (quanto di conduzzanza elettrica) sono dovuti a effetti quantistici. Lo spessore minimo del nanofilo è 1 atomo, per questo motivo gli effetti quantistici sono così grandi da essere visti a 300 K.

$$2e^2/h = 1/13,6 \text{ k}\Omega$$



Conduzzanza di un contatto puntiforme quantistico di dimensioni di centinaia di nm in un gas di elettroni bidimensionale in silicio.

La misura deve essere fatta a pochi kelvin per poter osservare la quantizzazione a causa della grandezza del contatto.

Quali nanostrutture avete con voi o a casa vostra?

Dove stanno?

Quanto sono importanti gli effetti quantistici in queste nanostrutture?

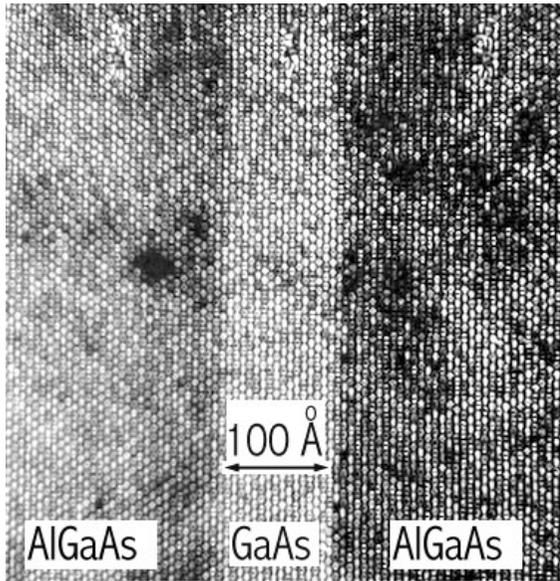
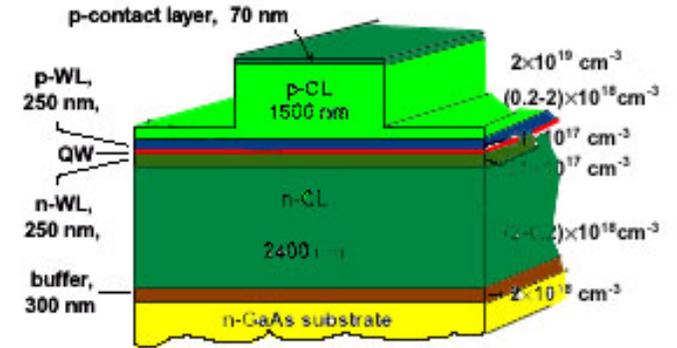
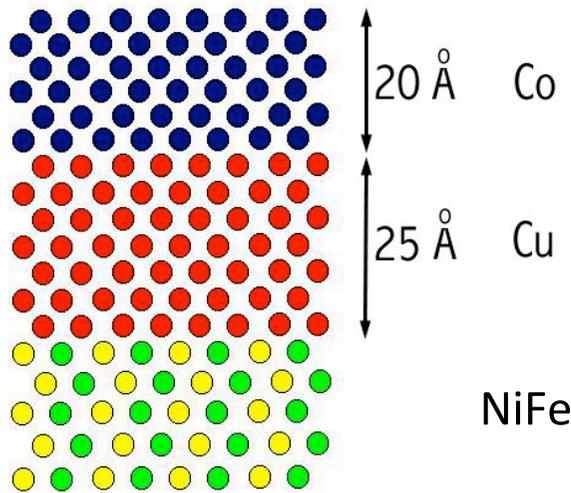


Immagine TEM di un pozzo quantico di GaAs in AlGaAs

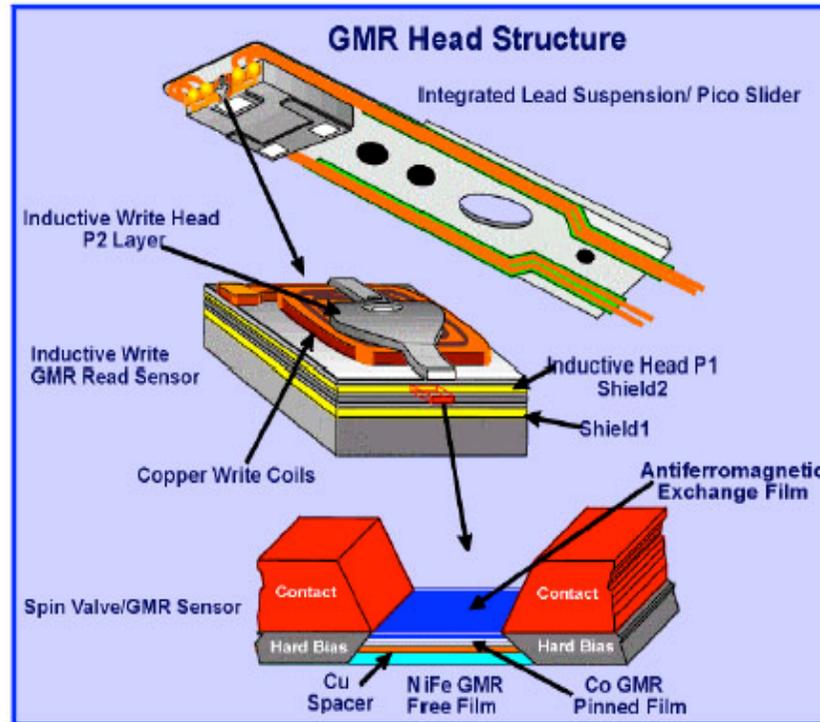


Schema di un diodo laser, QW e' il pozzo quantico (quantum well)

Le informazioni nelle fibre ottiche sono inviate dai diodi laser, i vostri CD sono letti da diodi laser



Schema di una spin valve



La testina che legge i vostri hard disk grazie alla magneto-resistenza gigante nella spin valve

Commercial IBM giant magnetoresistance read head.

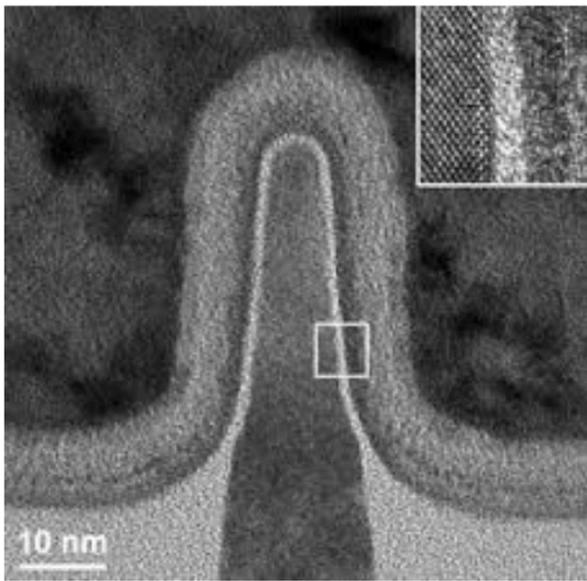


Immagine TEM di un transistor (MOSFET - FinFET) della CPU del vostro computer, le sue dimensioni sono dell'ordine di 10 nm e le parti più piccole (lo strato di ossido tra gate e channel) hanno spessore inferiore al nm. Qui gli effetti quantistici non dominano ancora (altrimenti non funzionerebbe). Ma siamo quasi al limite.

DAL 2024

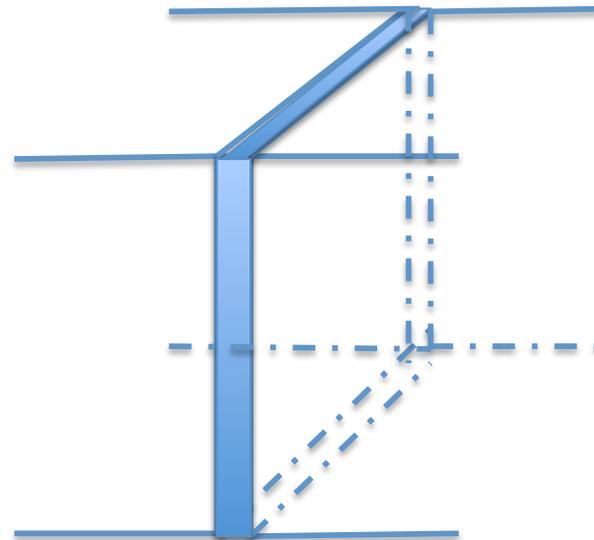
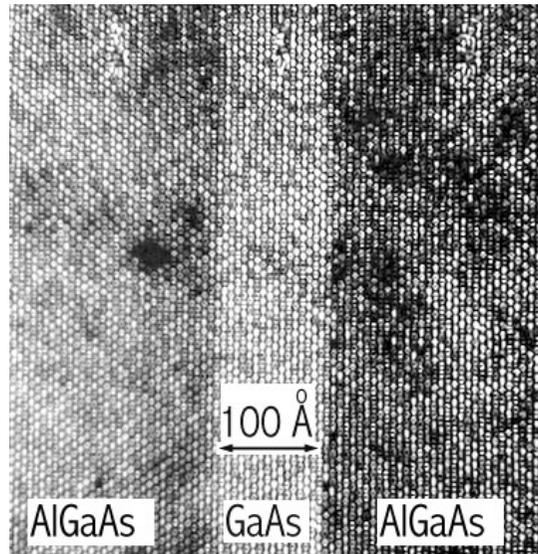


IMPORTANZA DELLE INTERFACCIE

Una nanostruttura di circa 10 nm contiene appox 3×10^4 atomi. Circa 5×10^3 atomi sono alla superficie della struttura, quindi con proprietà ben diverse da quelle degli atomi all'interno. Con circa 10% dei suoi atomi all'interfaccia con l'ambiente una nanostruttura è molto sensibile a effetti di superficie.

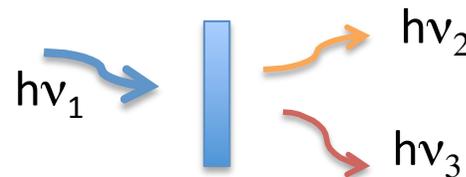
IN QUESTO LAB:

MISURE SULLE PROPRIETA' ELETTRONICHE DI POZZI QUANTICI DI SEMICONDUTTORI



MISURE DI FOTOLUMINESCENZA:

SI ECCITA IL SISTEMA CON FOTONI E SI MISURANO I FOTONI EMESSI DURANTE LA DISECCITAZIONE



LO SPETTRO DI FOTOLUMINESCENZA (LA DISTRIBUZIONE IN ENERGIA DEI FOTONI EMESSI) PERMETTE DI MISURARE

LE DIFFERENZE DI ENERGIE DEGLI STATI DEL SISTEMA

LA DISTRIBUZIONE DEGLI ELETTRONI IN QUESTI STATI

.....

PER CALCOLARE LE PROPRIETA' DI UN POZZO QUANTICO RICHIAMIAMO NOZIONI DI FISICA DEI SOLIDI CRISTALLINI

APPROSSIMAZIONI (richiamo)

Born-Oppenheimer

$$H = \sum_i T_i + \sum_I T_I + \sum_{i \neq j} V_{ij} + \sum_{iI} V_{iI} + \sum_{IJ} V_{IJ} \quad \Psi(\{r_i\}, \{R_I\})$$

I pezzi di H sono le energie cinetiche degli elettroni i, quelle dei nuclei I, le energie potenziali tra elettroni i e j, tra elettroni i e nuclei I, e tra nuclei I e J.

$\{r_i\}$ $\{R_I\}$ sono gli insiemi delle coordinate elettroniche (i) e nucleari (I)

Approssimazioni:

1) Si assume che la Ψ si possa scrivere come un prodotto, dove il primo termine dipende parametricamente dalle $\{R_I\}$ e il secondo solo da $\{r_i\}$

$$\Psi(\{r_i\}, \{R_I\}) = \Phi_{\{R_I\}}(\{r_i\}) \chi(\{R_I\})$$

2) inserendo questa funzione d'onda in H, si trascurano i termini tipo

$$\nabla_I \Phi_{\{R_I\}}(\{r_i\}) \nabla_I \chi(\{R_I\})$$

Si ottiene per gli elettroni

$$\left(\sum_i T_i + \sum_{i \neq j} V_{ij} + \sum_{il} V_{il} \right) \Phi_{\{R_I\}}(\{r_i\}) = E_{e,\{R_I\}} \Phi_{\{R_I\}}(\{r_i\}) \quad \text{Equazione x elettroni a nuclei fissi,}$$

$$\left(\sum_I T_I + \sum_{I \neq J} V_{IJ} + E_{e,\{R_I\}} \right) \chi(\{R_I\}) = E \chi(\{R_I\}) \quad \text{Equazione x nuclei}$$

$E_{e,\{R_I\}}$ Energia elettroni per una certa configurazione dei nuclei

Trovo il ground state dei nuclei e con quello mi trovo il ground state degli elettroni (approx vale se massa nuclei \gg massa elettroni, ma vedremo che per alcuni fenomeni non vale nemmeno in questo limite)

APPROSSIMAZIONE DI CAMPO MEDIO

Anche se potessi calcolarmi $\Phi_{\{R_I\}}(\{r_i\})$ che me ne faccio? Per un cristallo da 1 cm è una funzione di 10^{24} variabili, non saprei nemmeno leggerla (o scriverla).

Allora invece di considerare 10^{24} elettroni interagenti tra di loro nel loro potenziale istantaneo considero un solo elettrone nel campo medio autoconsistente di tutti gli altri elettroni, scrivo

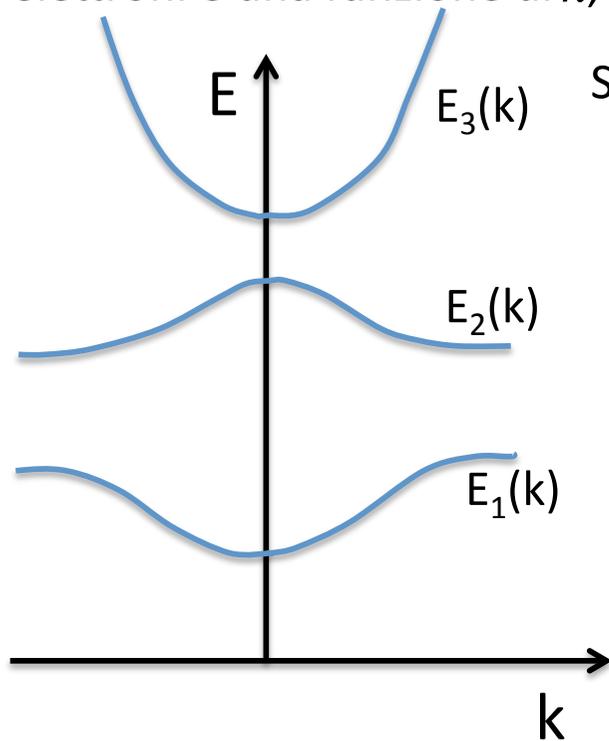
$$(-\hbar^2/2m\nabla^2 + V(r)) \phi(r) = E\phi(r) \quad \text{dove } V(r) \text{ è il potenziale dei nuclei + il potenziale medio di tutti gli altri elettroni}$$

(Vedremo che in alcuni casi non vale nemmeno questa approx.)

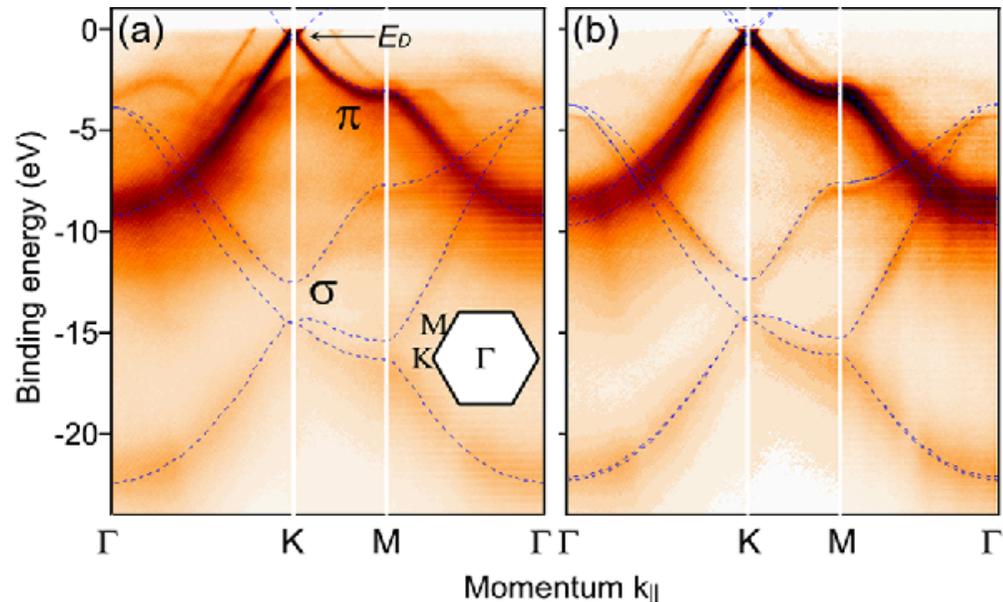
Se il sistema è periodico (cristallo), c'è invarianza per una serie di traslazioni spaziali, quindi esistono dei buoni numeri quantici \vec{k} e la funzione d'onda è

$$\phi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{\vec{k},n}(\vec{r}) \text{ dove } u_{\vec{k},n}(\vec{r}) \text{ è una funzione periodica (col periodo del cristallo)} \\ \text{(Teorema di Bloch)}$$

I valori di \vec{k} non equivalenti si trovano dentro la prima zona di Brillouin, l'energia degli elettroni è una funzione di \vec{k} , per un certo \vec{k} ci sono infinite $E_n(\vec{k})$, $n=1,2,3,\dots$



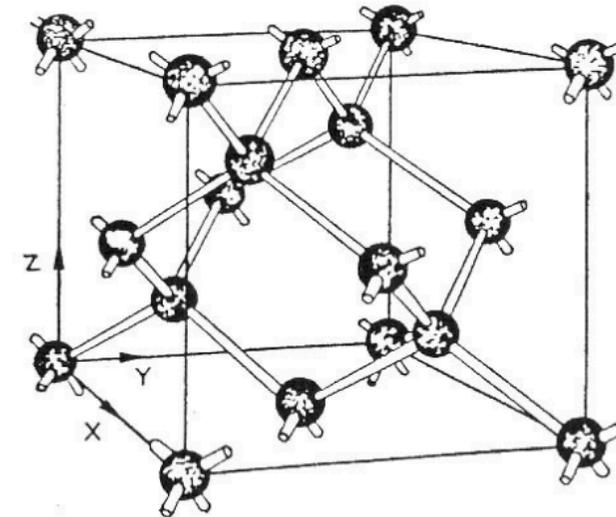
Struttura a bande di un cristallo



Come si vedono sperimentalmente le bande con la fotoemissione (grafite)

STRUTTURA ELETTRONICA DI ALCUNI SEMICONDUTTORI 3D

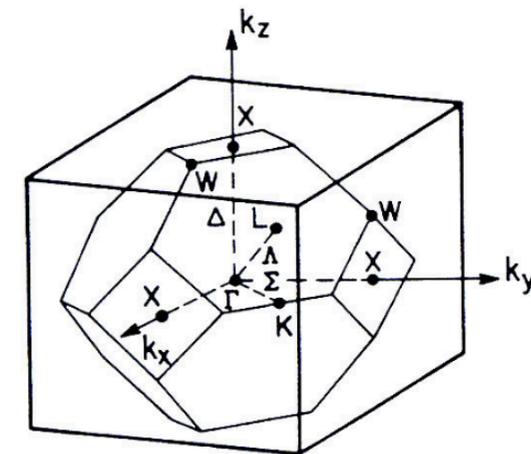
1 1A																	18 VIII A				
1 H Hydrogen 1.008																	2 He Helium 4.002602				
3 Li Lithium 6.94	4 Be Beryllium 9.0121831															5 B Boron 10.81	6 C Carbon 12.011	7 N Nitrogen 14.007	8 O Oxygen 15.999	9 F Fluorine 18.99840323	10 Ne Neon 20.1797
11 Na Sodium 22.98976928	12 Mg Magnesium 24.305															13 Al Aluminum 26.9815385	14 Si Silicon 28.0855	15 P Phosphorus 30.973761998	16 S Sulfur 32.06	17 Cl Chlorine 35.45	18 Ar Argon 39.948
19 K Potassium 39.0983	20 Ca Calcium 40.078	21 Sc Scandium 44.955908	22 Ti Titanium 47.867	23 V Vanadium 50.9415	24 Cr Chromium 51.9961	25 Mn Manganese 54.938044	26 Fe Iron 55.845	27 Co Cobalt 58.933194	28 Ni Nickel 58.6934	29 Cu Copper 63.546	30 Zn Zinc 65.38	31 Ga Gallium 69.723	32 Ge Germanium 72.6305	33 As Arsenic 74.921595	34 Se Selenium 78.971	35 Br Bromine 79.904	36 Kr Krypton 83.798				
37 Rb Rubidium 85.4678	38 Sr Strontium 87.62	39 Y Yttrium 88.90584	40 Zr Zirconium 91.224	41 Nb Niobium 92.90637	42 Mo Molybdenum 95.94	43 Tc Technetium (98)	44 Ru Ruthenium 101.07	45 Rh Rhodium 102.90550	46 Pd Palladium 106.42	47 Ag Silver 107.8682	48 Cd Cadmium 112.414	49 In Indium 114.818	50 Sn Tin 118.710	51 Sb Antimony 121.760	52 Te Tellurium 127.60	53 I Iodine 126.90447	54 Xe Xenon 131.293				
55 Cs Caesium 132.90545196	56 Ba Barium 137.327	57 - 71 Lanthanoids	72 Hf Hafnium 178.49	73 Ta Tantalum 180.94788	74 W Tungsten 183.84	75 Re Rhenium 186.207	76 Os Osmium 190.23	77 Ir Iridium 192.222	78 Pt Platinum 195.084	79 Au Gold 196.966569	80 Hg Mercury 200.592	81 Tl Thallium 204.38	82 Pb Lead 207.2	83 Bi Bismuth 208.98040	84 Po Polonium (209)	85 At Astatine (210)	86 Rn Radon (222)				
87 Fr Francium (223)	88 Ra Radium (226)	89 - 103 Actinoids	104 Rf Rutherfordium (261)	105 Db Dubnium (262)	106 Sg Seaborgium (263)	107 Bh Bohrium (264)	108 Hs Hassium (265)	109 Mt Meitnerium (266)	110 Ds Darmstadtium (268)	111 Rg Roentgenium (269)	112 Cn Copernicium (285)	113 Nh Nihonium (286)	114 Fl Flerovium (289)	115 Mc Moscovium (290)	116 Lv Livermorium (293)	117 Ts Tennessine (294)	118 Og Oganesson (294)				



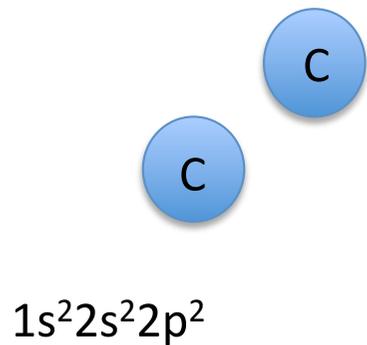
Perspective view of diamond structure.

Reticolo cubico a facce centrate (fcc)
Base di due atomi, uno in $(0,0,0)$, l'altro in $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$

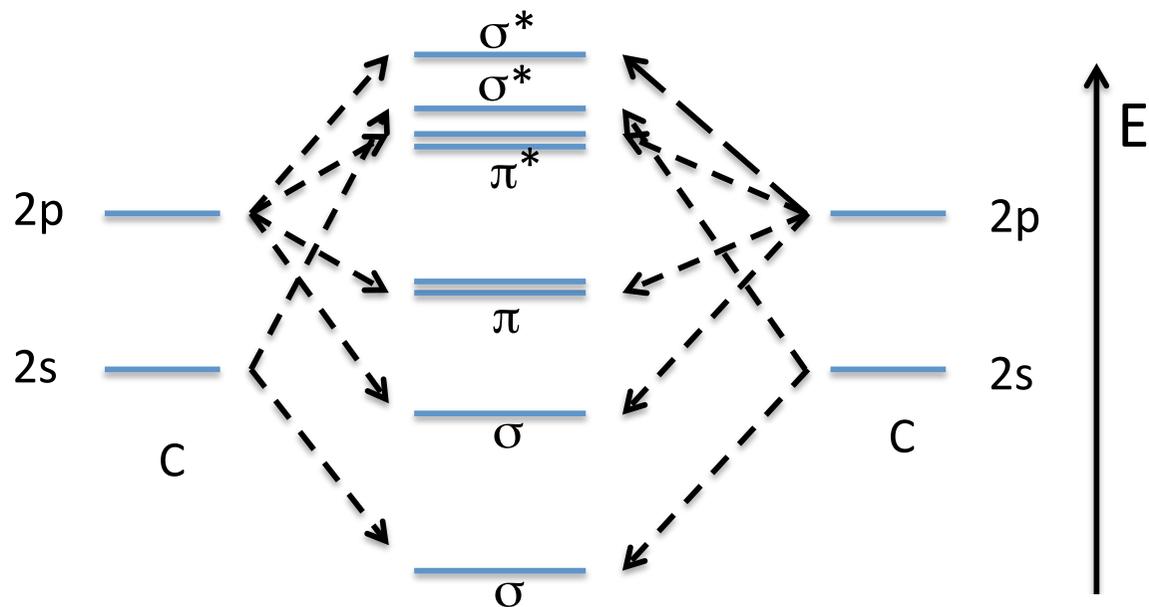
Nella base di 2 atomi ci sono 8 elettroni di valenza
(4 elettroni 2s e 2p per atomo nel C, 3s e 3p nel Si, 4s e 4p nel Ge...)



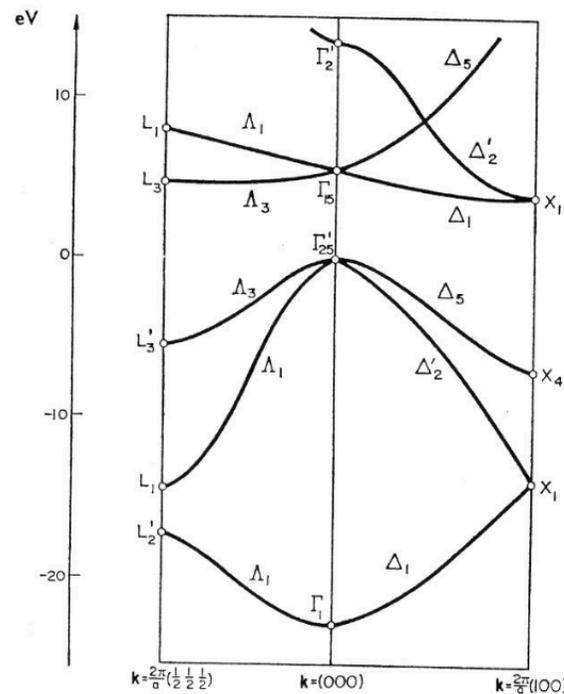
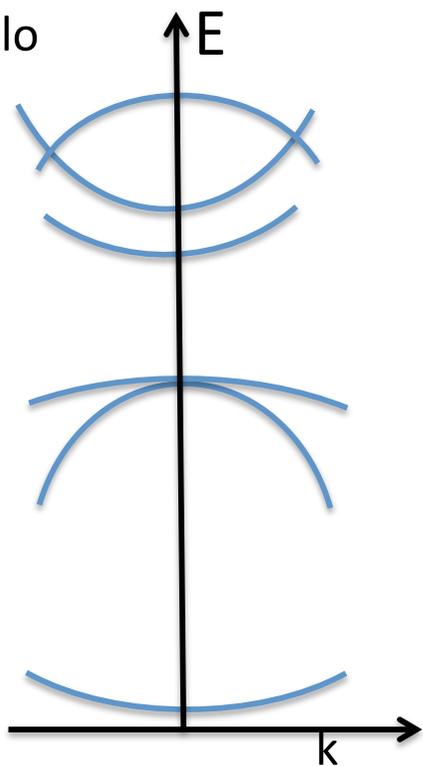
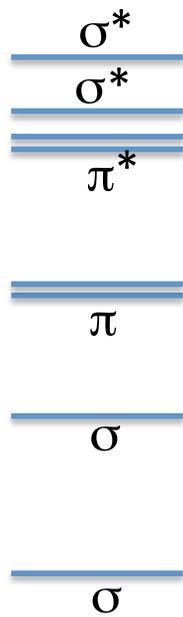
Brillouin zone for diamond and zincblend lattices



Atomo -> dimero



Dimero -> cristallo

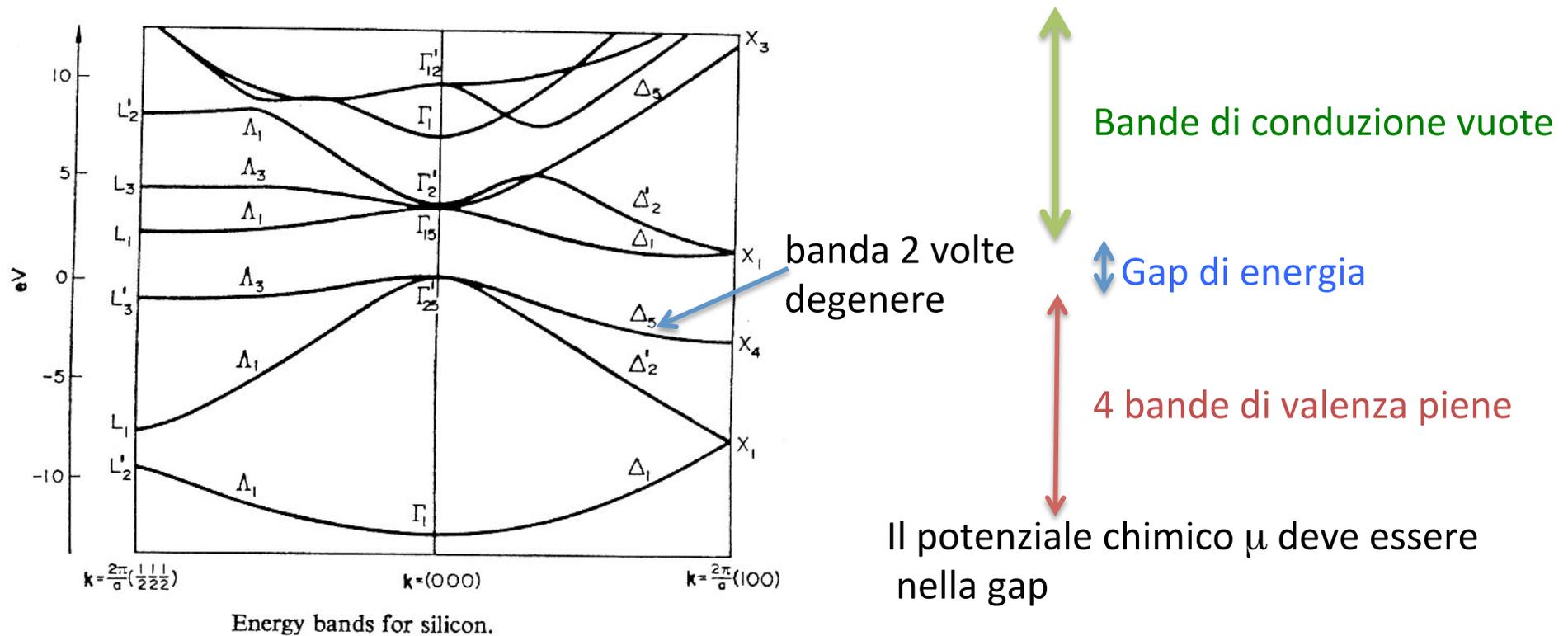


Energy bands for diamond. (From Bassani and Yoshimine, ref. [2].) The zero of energy has been taken to lie at the top of the valence band.

Ogni atomo C ha 4 elettroni di valenza, ogni dimero ne ha 8, quindi 8 elettroni di valenza per cella elementare ho tanti k quante celle elementari ho nel mio cristallo, per ogni k posso mettere 2 elettroni in una banda (se il sistema non è magnetico),

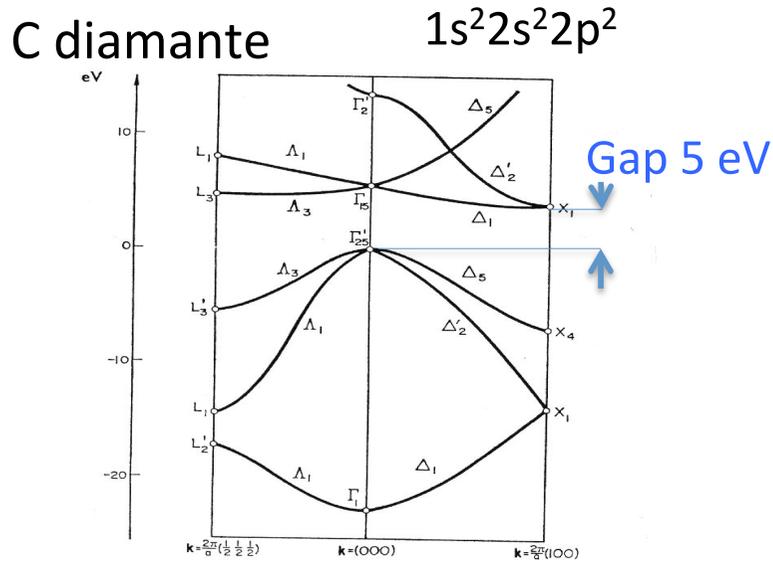


riempio completamente le prime 4 bande, e le altre sono vuote.

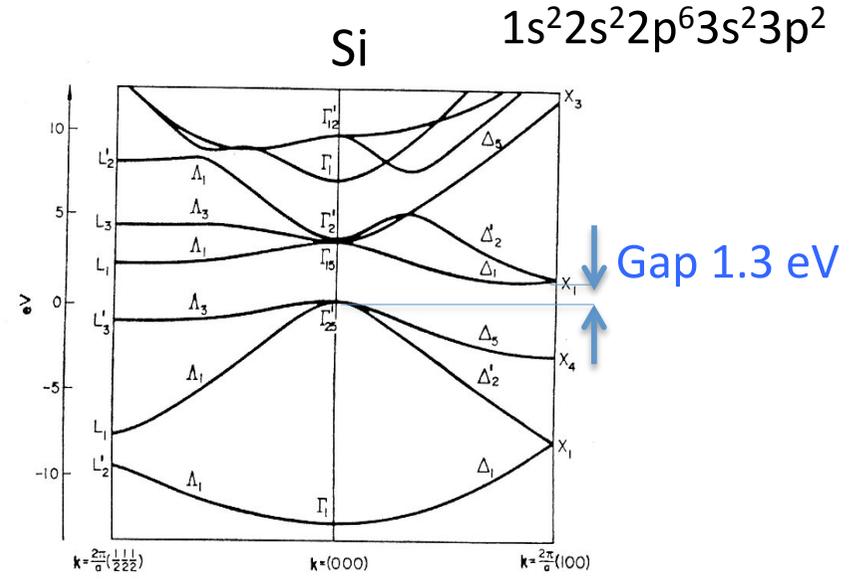


La banda di valenza 2 volte degenere è tale perchè deriva dai legami π e per la simmetria del cristallo

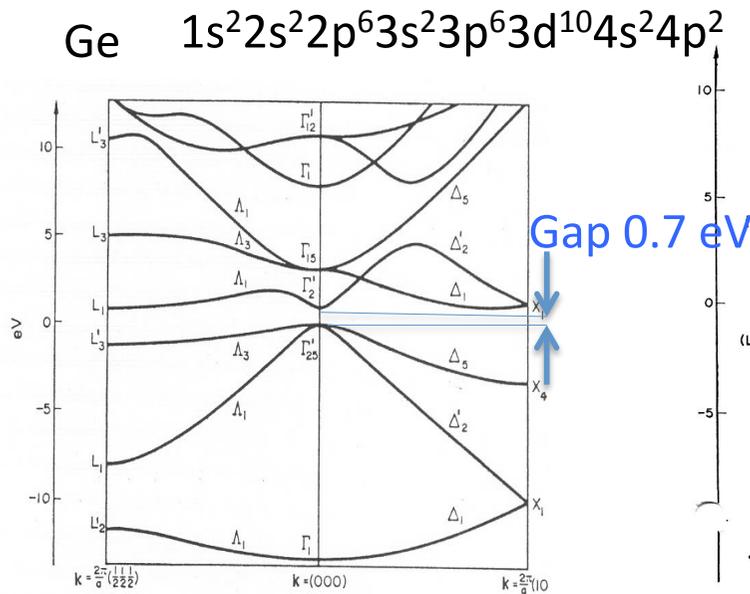
STRUTTURE A BANDE



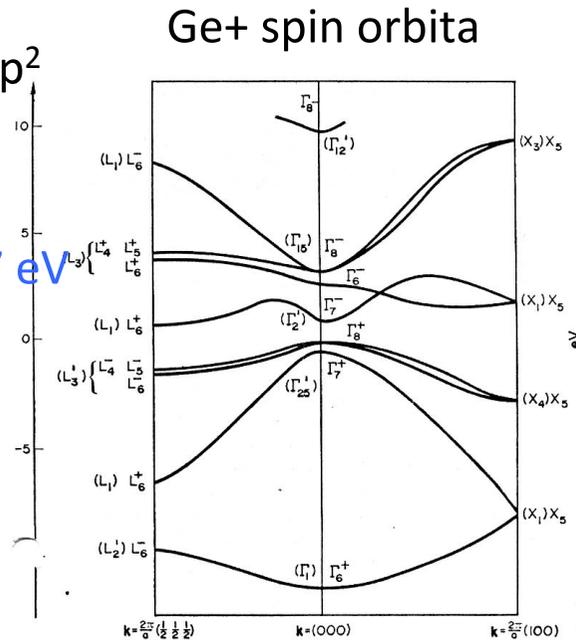
1 Energy bands for diamond. (From Bassani and Yoshimine, ref. [2].) The zero of energy has been taken to lie at the top of the valence band.



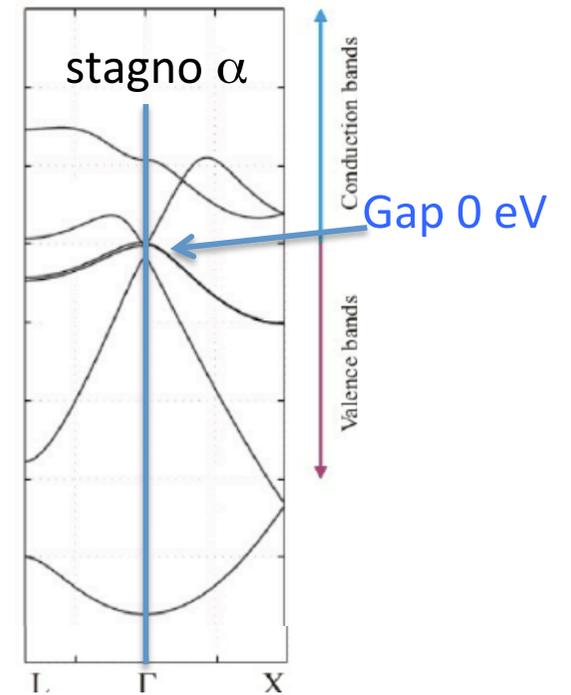
Energy bands for silicon.



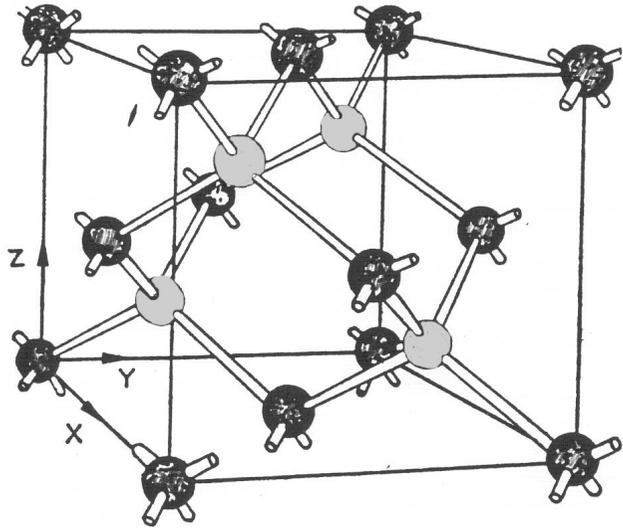
Energy bands for germanium.



Energy bands for germanium with the inclusion of spin-orbit interaction. In brackets we provide the irreducible representations for the states of the simple group. (From ref. [15].)



GaAs



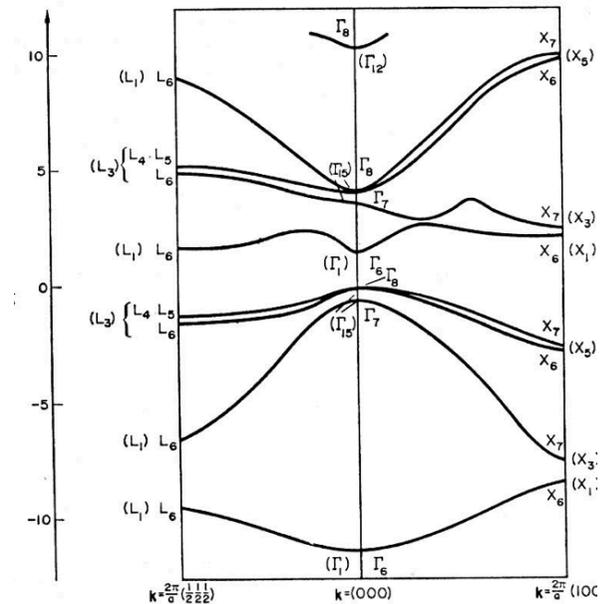
Perspective view of zincblende structure

fcc, base costituita da un atomo di Ga in $(0,0,0)$ e un atomo di As in $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$

La base Ga-As ha lo stesso numero di elettroni di un dimero Ge-Ge, il potenziale mediato sui due atomi è simile a quello del dimero Ge-Ge, quindi struttura a bande del GaAs somiglia a quella del Ge

1 IA												18 VIIIA																							
1	H											2	He																						
2 IIA												10 VIIIA																							
3	Li	4	Be											6	C	7	N	8	O	9	F	10	Ne												
11	Na	12	Mg	3	Al	4	Si	5	P	6	S	7	Cl	8	Ar																				
19	K	20	Ca	21	Sc	22	Ti	23	V	24	Cr	25	Mn	26	Fe	27	Co	28	Ni	29	Cu	30	Zn	31	Ga	32	Ge	33	As	34	Se	35	Br	36	Kr
37	Rb	38	Sr	39	Y	40	Zr	41	Nb	42	Mo	43	Tc	44	Ru	45	Rh	46	Pd	47	Ag	48	Cd	49	In	50	Sn	51	Sb	52	Te	53	I	54	Xe
55	Cs	56	Ba	57-71	Lanthanoids	72	Hf	73	Ta	74	W	75	Re	76	Os	77	Ir	78	Pt	79	Au	80	Hg	81	Tl	82	Pb	83	Bi	84	Po	85	At	86	Rn
87	Fr	88	Ra	89-103	Actinoids	104	Rf	105	Db	106	Sg	107	Bh	108	Hs	109	Mt	110	Ds	111	Rg	112	Cn	113	Nh	114	Fl	115	Mc	116	Lv	117	Ts	118	Og

Differenza con C, Si, Ge : gap diretta



Energy bands for GaAs with the inclusion of spin-orbit interaction. The irreducible representations for the states of the simple group are supplied in brackets. (From ref. [15].)

AlAs

AlAs ha la stessa struttura cristallina del GaAs (al trivalente Ga sostituisco il trivalente Al)
 La sua struttura a bande somiglia a quella del GaAs, la principale differenza è la gap piu' larga e il minimo delle banda di condizione non a Γ ($k=0$)

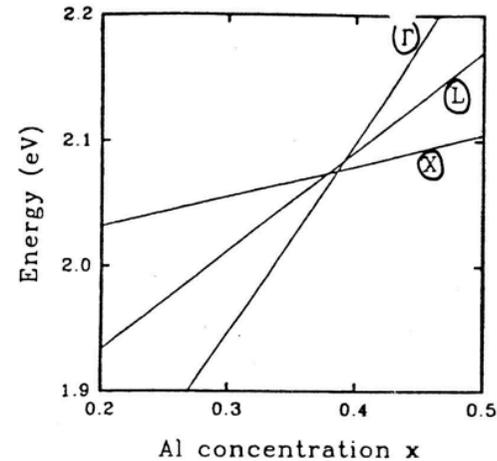
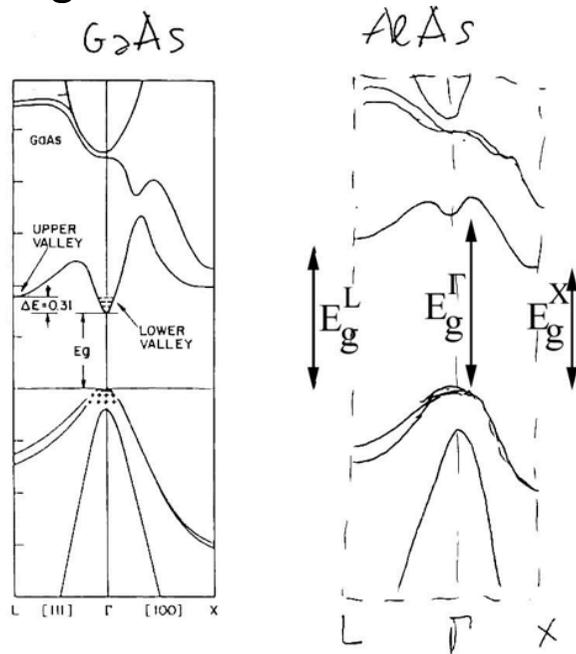


FIG. 5. The energy of the Γ , X, and L energy gaps vs Al concentration x at low temperature as given by the equations reported in Table III.



Il composto ternario ha la stessa struttura del GaAs, ma su ogni sito del Ga c'è probabilità x di trovarci Al e $1-x$ di trovarci Ga. La sua struttura a bande e' intermedia tra quella del GaAs e quella dell' AlAs

MASSA EFFICACE

$$m_{ij}^* = \hbar^2 / (\delta^2 E(k) / \delta k_i \delta k_j)$$

Approssimazione del cristallo virtuale

Ma il composto $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ non ha una simmetria per traslazioni spaziali, e' una lega disordinata. Se non e' invariante per traslazioni di un reticolo di Bravais allora k non è un buon numero quantico e non può esistere una struttura a bande.

Posso provare però questa approssimazione:

Trovo un **cristallo periodico virtuale** (per cui vale Bloch e struttura a bande) che sia la migliore approssimazione del mio solido (lega) reale, mi calcolo la struttura a bande e le autofunzioni, e poi tratto la differenza tra il potenziale del solido reale e quello del cristallo virtuale come potenziale di perturbazione in teoria delle perturbazioni.