

**Corso di Laurea in Fisica**  
**a.a. 2004-2005**  
**Fisica dei materiali per la fotonica**  
**Titolare: Prof. Emilio Doni**

**Programma.**

Materiali di interesse per la fotonica: tra questi il corso si concentra sui semiconduttori formati con elementi delle colonne II, III, IV, V e VI della tabella periodica. Possibilità di produrre materiali con diverse composizioni: binari, ternari, quaternari, con conseguenti variazioni fisiche e di reticolo. Eterostrutture e strutture a dimensionalità ridotta.

Metodi di crescita di cristalli di massa: Czochralski, Bridgman. Sostrati. Metodi di crescita di strutture: LPE, VPE, MOCVE, MBE. Metodi di controllo della crescita, in MBE in particolare: LEED, RHEED. Metodi di controllo della composizione: AES. Metodi di analisi diretta delle superfici: STM, AFM. Cenno ai problemi di compatibilità reticolare nella formazione di strati su diversi supporti: tensioni reticolari, dislocazioni, formazione di isole.

Descrizione e classificazione dei reticoli cristallini. Reticoli di Bravais. Caso dei reticoli in due dimensioni. Simmetrie dei reticoli di Bravais. Reticoli primitivi e convenzionali. Reticoli reali, basi. Reticoli cubici a facce (fcc) e a corpo (bcc) centrati. Reticolo esagonale a impacchettamento compatto (hcp). Reticoli di diamante, zinblend, wurtzite.

Richiami generali di teoria dei gruppi finiti. Definizione di classe. Rappresentazione di un gruppo finito, caratteri di una rappresentazione. Rappresentazioni irriducibili, richiamo sulle loro proprietà, relazioni di ortogonalità, cenni sui criteri per la identificazione delle rappresentazioni irriducibili di un gruppo finito.

Gruppo spaziale. Sottogruppo delle traslazioni; traslazioni frazionarie. Gruppi spaziali simmorfi e non simmorfi. Gruppo ciclico, sue rappresentazioni. Rappresentazioni irriducibili del gruppo delle traslazioni. Condizioni di Born-von Kärman. Cella fondamentale del reticolo reciproco di un reticolo cristallino. Cella di Wigner-Seitz. Zona di Brillouin. Esempi di zone di Brillouin per reticoli fcc e bcc. Vettore  $k$  della zona di Brillouin come indice della rappresentazione irriducibile del gruppo delle traslazioni pure.

Rappresentazioni irriducibili per il gruppo spaziale. Piccolo gruppo di  $k$ , piccolo gruppo puntuale di  $k$ . Metodi per la identificazione delle rappresentazioni irriducibili per  $k$  assegnato. Cenno al caso di  $\exp\{ik \cdot f\} \neq 1$  per gruppi non simmorfi. Stella di vettori della zona di Brillouin generata da  $k$ .

Relazione tra rappresentazioni del gruppo di simmetria di un operatore e i suoi autostati. Funzioni partner in una rappresentazione irriducibile. Trasformazione di una funzione delle coordinate spaziali sotto operazioni di simmetria. Relazioni di ortogonalità tra autostati appartenenti a righe diverse di rappresentazioni irriducibili della stesso gruppo di simmetria. Regole di selezione per elementi di matrice di operatori. Conseguenza delle proprietà del gruppo spaziale: la forma di Bloch delle autofunzioni di una hamiltoniana periodica.

Funzioni d'onda per singolo elettrone in potenziale periodico; quasi-impulso. Approssimazioni che giustificano l'utilizzo di funzioni d'onda a singolo elettrone. Approssimazione di Born-Oppenheimer, equazioni per la parte elettronica e per quella vibrazionale. Sistemi a molti elettroni: cenno ai criteri per identificare equazioni per funzione d'onda a elettrone singolo; cenno alle equazioni di Hartree e di Hartree-Fock.

Equazione di Schrödinger per singolo elettrone in potenziale periodico: hamiltoniana parametrica in  $k$ .

Concetto di banda di energia. Criteri per il riempimento delle bande. Esempi semplici: catene unidimensionali con uno o due centri per cella. Criteri per distinguere metalli e non metalli. Sviluppo perturbativo di  $E(k)$  attorno ad un  $k_0$ . Concetto di massa efficace. Stima di  $\langle v \rangle$  e collegamento a  $\partial E(k)/\partial k$ .

Cenno ai metodi approssimati per il calcolo delle bande di energia di elettroni in reticoli. Determinante secolare. Metodo del legame stretto; somme di Bloch, elementi di matrice tra somme di Bloch. Approssimazione a due centri, cenno agli sviluppi di Slater-Koster per  $\lambda=0,1$ . Applicazione al caso di elettroni  $s$  in reticolo fcc, discussione della dispersione delle bande. Solo i risultati per elettroni  $p$ . Cenno agli sviluppi in onde piane, alla necessità di ortogonalizzare agli stati di core, agli pseudopotenziali.

Descrizione delle bande elettroniche di energia di Si, Ge e AsGa. Gap diretto e indiretto. Effetti della interazione spin-orbita sui livelli di valenza dei materiali cubici del gruppo IV e III-V. Considerazioni sulla simmetria dei livelli elettronici considerando anche lo spin: trasformazione degli spinori per rotazione, gruppo doppio. Separazione dei livelli di tipo  $p$  al punto  $\Gamma$  delle bande di valenza in composti cubici. Bande light-hole, heavy-hole, split-off. Collegamento tra la dispersione delle bande e la massa efficace.

Introduzione all'ottica dei materiali cristallini. Tipi di misure effettuabili: assorbimento, riflettività. Sorgenti disponibili: luce di sincrotrone, laboratori vicini dove se ne può disporre. Funzioni ottiche nei mezzi materiali: assorbimento, riflettività (normale), indice di rifrazione e coefficiente di estinzione, parte reale e immaginaria della costante dielettrica, relazioni tra loro prodotte dalle equazioni di Maxwell.

Interpretazione microscopica dell'assorbimento in un materiale. Transizioni ottiche, transizioni 'verticali' nei mezzi cristallini. Approssimazione di dipolo. Densità congiunta degli stati e origine delle singolarità che vi si possono presentare. Tipi di singolarità, effetto della dimensionalità del reticolo (tre, due e una dimensione), minimi, massimi e punti sella. Esempi di spettri di assorbimento e loro interpretazione: germanio, grafite. Cenno agli effetti eccitonici alla Wannier, esempio dello spettro di assorbimento in GaAs.

Composti con gap indiretto. Necessità di spiegarli con effetti al secondo ordine. Vibrazioni reticolari: introduzione con modello a una dimensione: branche acustiche e branche ottiche. Cenno alla quantizzazione delle vibrazioni reticolari: fononi; localizzazione e delocalizzazione della vibrazione. Assorbimento in materiali a gap indiretto, con assorbimento o emissione di fonone. Forma dell'assorbimento con bande paraboliche.

Composti misti III-V e II-VI: dipendenza dalla percentuale dei componenti delle proprietà ottiche e dei parametri reticolari. Strutture a dimensionalità ridotta: quantum well, loro tipi principali. Formazione di livelli in quantum well, sottobande. Superreticoli: minibande. Cenno alle oscillazioni di Bloch.

#### *Lecture consigliate per un maggior approfondimento degli argomenti proposti.*

I riferimenti principali sono il libro di G.Grosso e G.Pastori Parravicini, *Solid State Physics* e quello di F.Bassani e G.Pastori Parravicini, *Electronic States and Optical Transitions in Solids*: a questo si rimanda per la teoria dei gruppi. Sono utili anche i libri di P.Y.Yu e M.Cardona, *Fundamentals of Semiconductors*, di J.Singh, *Electronic and Optoelectronic Properties of Semiconductor Structures*, e di V.M.Mitin, V.A.Kochelap e M.A.Stroscio, *Quantum Heterostructures*. Una presentazione semplice di parte degli argomenti trattati nel corso si trova in due voci della Enciclopedia delle Scienze Fisiche dell'Istituto della Enciclopedia Italiana: *Solidi, Livelli Elettronici*, a cura di E.Doni, G.Grosso e G.Pastori Parravicini, e *Solidi, Transizioni Ottiche*, a cura di F.Bassani e E.Doni.