



Fisica dello Stato Solido

Lezione n. 7

Principi di teoria delle bande

Corso di Laurea Magistrale in
Ingegneria Elettronica

a.a.17-18

<http://www.de.unifi.it/FISICA/Bruzzi/fss.html>

Principi di Teoria delle Bande

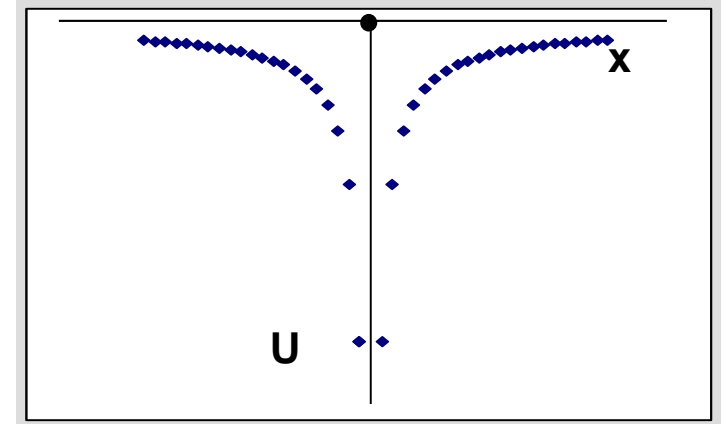
Sommario

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.

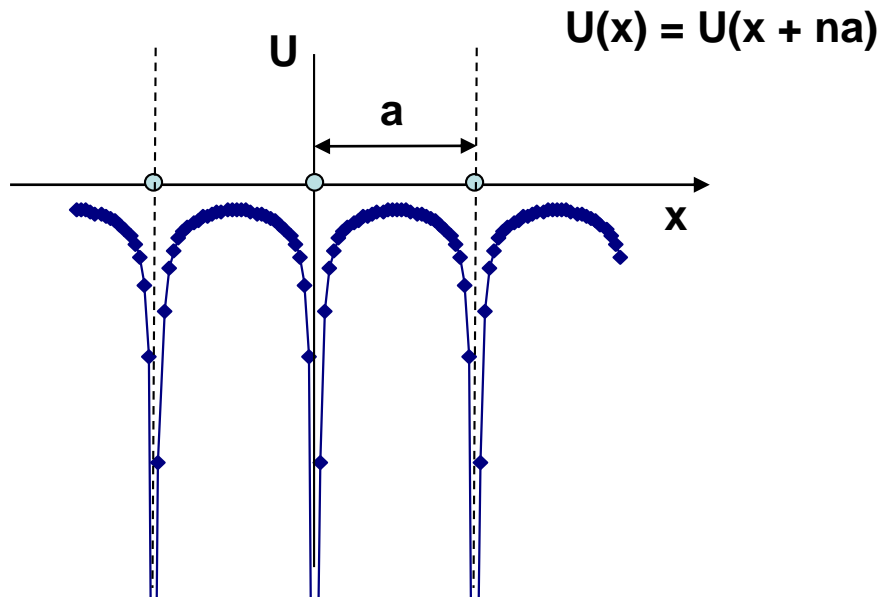
Potenziale Periodico

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: $|\varphi(x)|^2 dx$

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.

$|\varphi(x)|^2 = |\varphi(x + na)|^2$ Perché 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: $C = e^{ikna}$, allora: $\varphi_k(x + na) = e^{ikna} \varphi_k(x)$, da cui:

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

$e^{-ikx} \varphi_k(x) = e^{-ik(x+na)} \varphi_k(x + na)$. 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

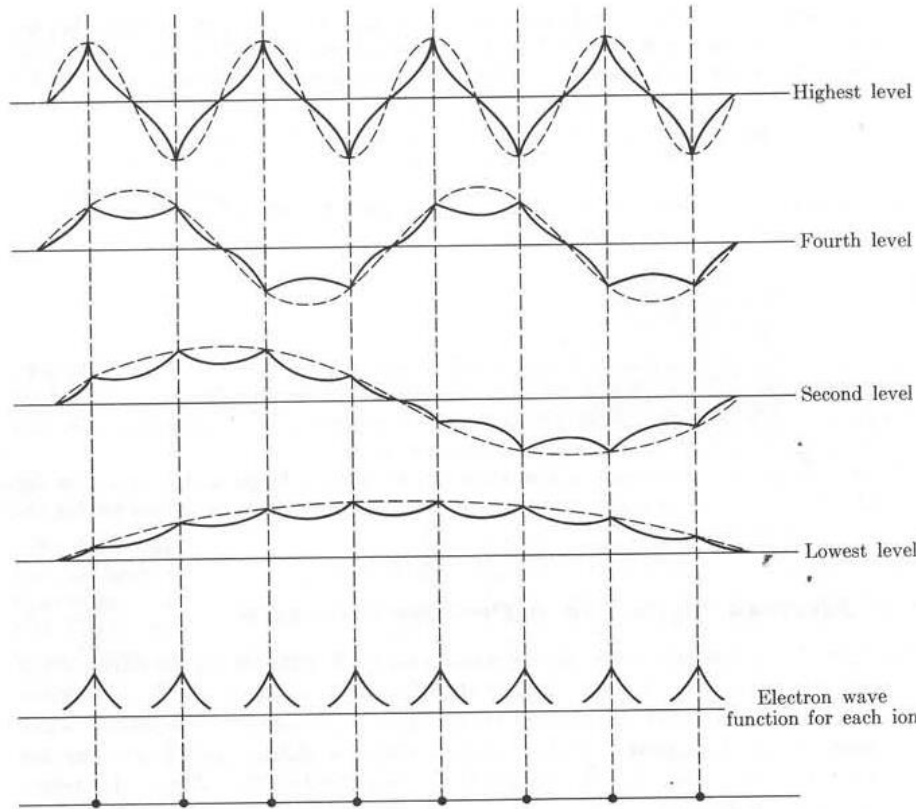
sono dette **funzioni di Bloch**.

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

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

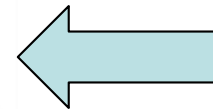
Notiamo che la presenza del potenziale periodico provoca una modulazione dell'onda secondo la simmetria del reticolo, tale modulazione è rappresentata da $u_k(x)$ ed associata al vettore d'onda k .

Possiamo immaginare di ottenere una descrizione qualitativa delle funzioni d'onda di Bloch considerando che la $u(x)$ deve richiamarsi alla funzione d'onda degli atomi del reticolo quando sono isolati mentre il termine e^{ikx} può essere sostituito con le funzioni d'onda di una particella libera nella buca di potenziale costituita dal materiale di lato L :



Esempio di funzioni d'onda di Bloch in un reticolo composto da otto ioni

$$\psi(x) = e^{ikx}u(x)$$



$$u(x + a) = u(x).$$

Risoluzione dell'equazione di Schroedinger mediante analisi di Fourier della funzione φ

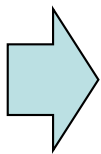
La funzione d'onda φ dell'elettrone nel solido può essere scritta come somma di onde piane (serie di Fourier) :

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

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 significa **trovare l'espressione di tutti i coefficienti $C_{\underline{k}}$** .

Osserviamo che non assumiamo, e generalmente non è vero, che $\phi(x)$ (scendendo al caso unidimensionale) sia essa stessa periodica per traslazioni nella costante reticolare a . **Le proprietà di traslazione di $\phi(x)$ sono quelle indicate dal teorema di Bloch**.



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

\underline{R} vettore del reticolo cristallino

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 Schrödinger:

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

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^{iKx} 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 $\varphi(\underline{r}) = \sum_k C_k e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ non sono molte, ed il calcolo si semplifica.

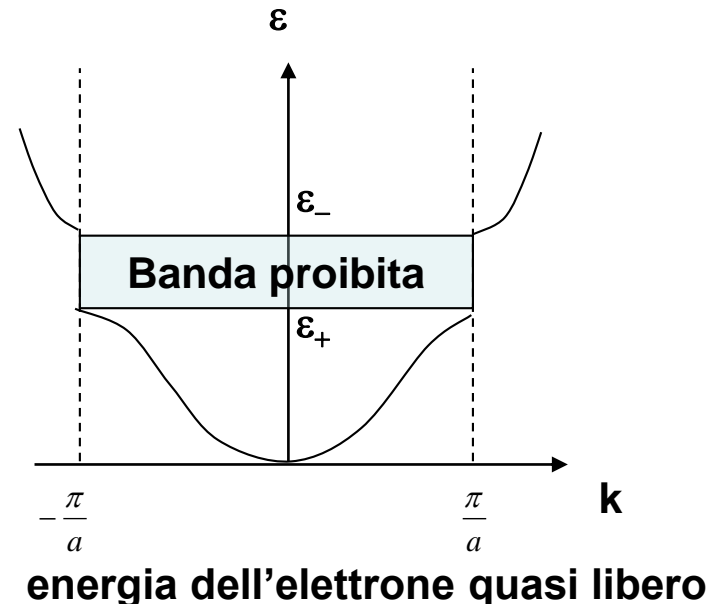
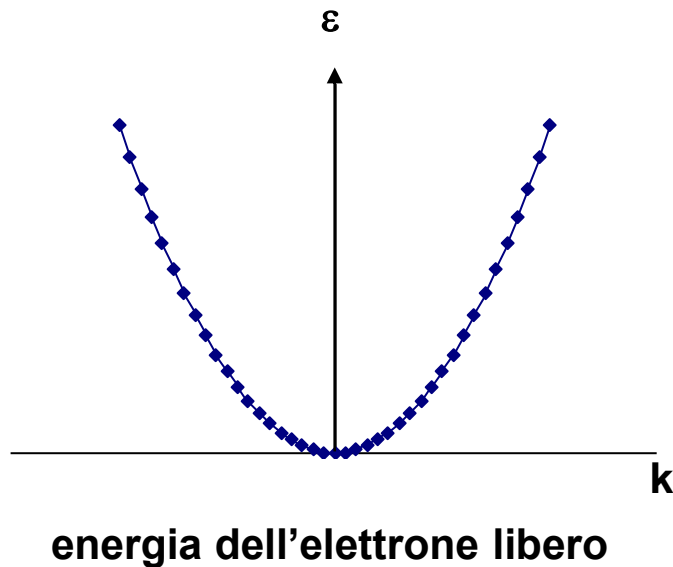
Un utile esempio è quello in cui il potenziale periodico degli ioni sia debole.

Approssimazione di potenziale periodico debole (elettrone quasi libero)

La struttura a bande di un cristallo può essere spiegata considerando un modello di elettrone quasi libero per cui gli elettroni nelle bande sono visti come perturbati solo debolmente dal potenziale periodico degli ioni. Questo modello spiega qualitativamente molto efficacemente il comportamento degli elettroni nei metalli.

Nel modello ad elettrone quasi libero 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.



Approssimazione di potenziale periodico debole (elettrone quasi libero)

Se il potenziale periodico $U(r)$ dovuto agli ioni è molto debole, il suo effetto diventa importante solo 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: $\varphi_k(x) = Ae^{ikx}$

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

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:

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

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: $K = \frac{1}{2} G$.

Nota 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 :

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

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

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

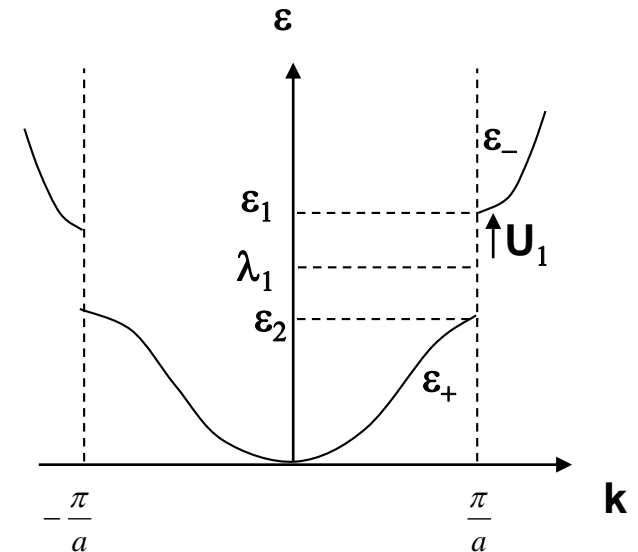
$$\varepsilon = \frac{1}{2}(\lambda_{K-G} + \lambda_K) \pm \sqrt{\frac{1}{4}(\lambda_{K-G} - \lambda_K)^2 + U_1^2}$$

(2) Vicino a bordo zona:

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

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

$$\varepsilon_+ = \varepsilon_2 + \frac{\hbar^2 \delta^2}{2m} \left(1 - \frac{2\lambda_1}{U_1}\right) \quad \varepsilon_2 = \lambda_1 - U_1$$

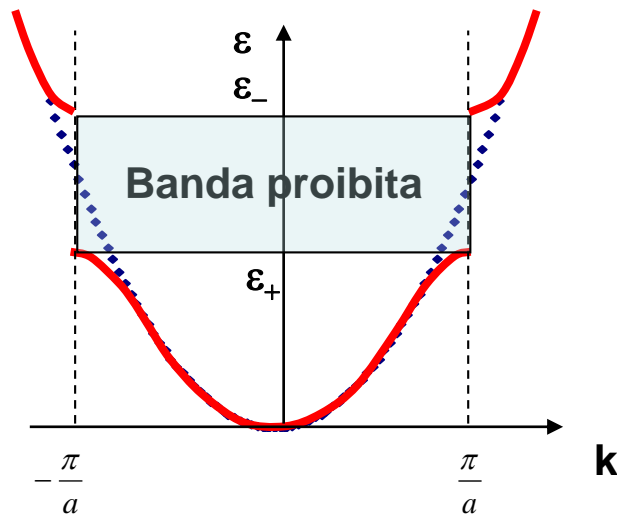


L'energia dipende da δ^2 perciò ha andamento parabolico nelle vicinanze di $\frac{1}{2} G$. Poiché si può ipotizzare che $\lambda_1/U_1 \gg 1$ (potenziale debole) il coefficiente che moltiplica il termine in δ^2 è negativo e quindi la concavità è negativa per il caso ε_+ .

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,

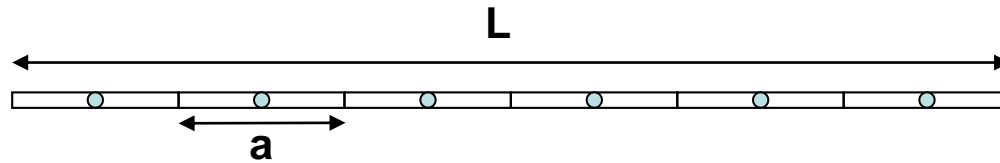
corrispondenti a due valori di energia permessi. Vicino a bordo zona ho piegamento della funzione $\varepsilon(k)$ in modo da avere tangente nulla a bordo zona. Si creano così **BANDE DI ENERGIA PROIBITA**.



energia dell'elettrone quasi libero

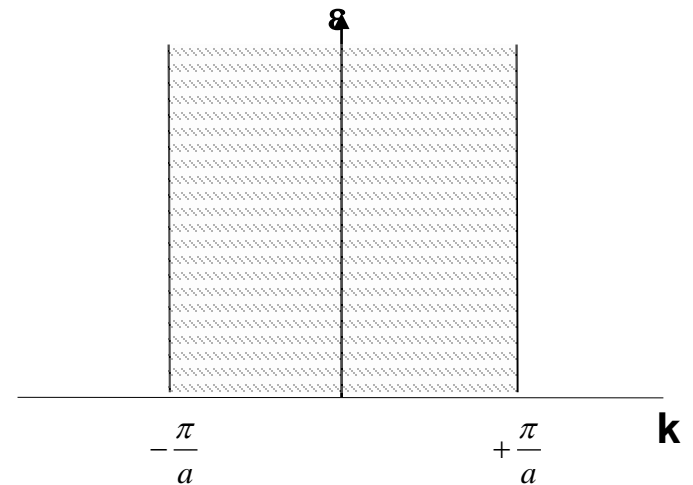
K permessi e I zona di Brilluoin

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



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

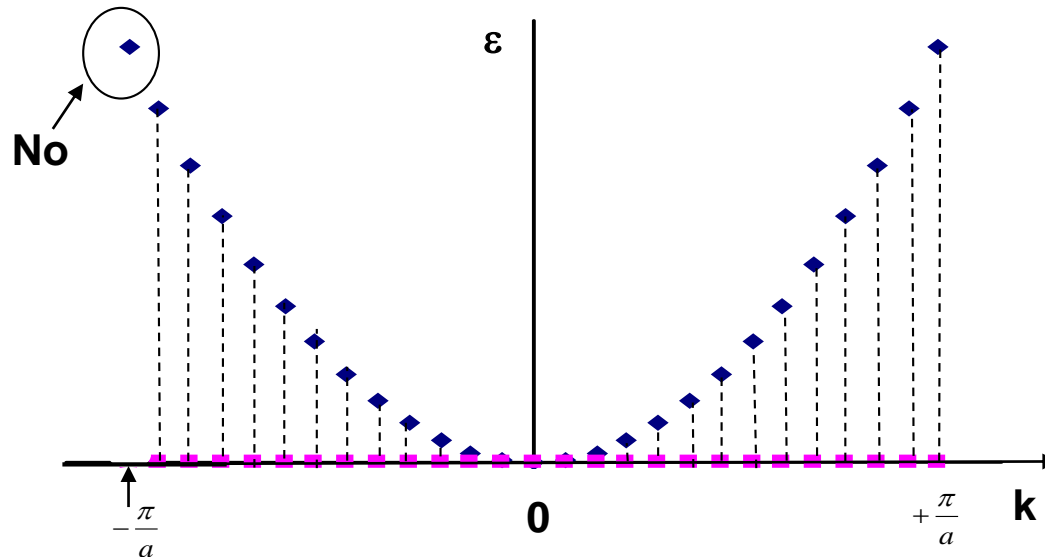
Ricordiamo che la I prima zona di Brilluoin è data dallo spazio k più vicino ad un punto del reticolo reciproco che ad ogni altro punto del reticolo reciproco. Allora la prima zona di Brilluoin, nel caso unidimensionale, è data da tutti i k compresi tra $-\frac{1}{2}G = -\frac{\pi}{a}$ e $+\frac{1}{2}G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



Prima zona di Brilluoin - caso mono dimensionale

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**

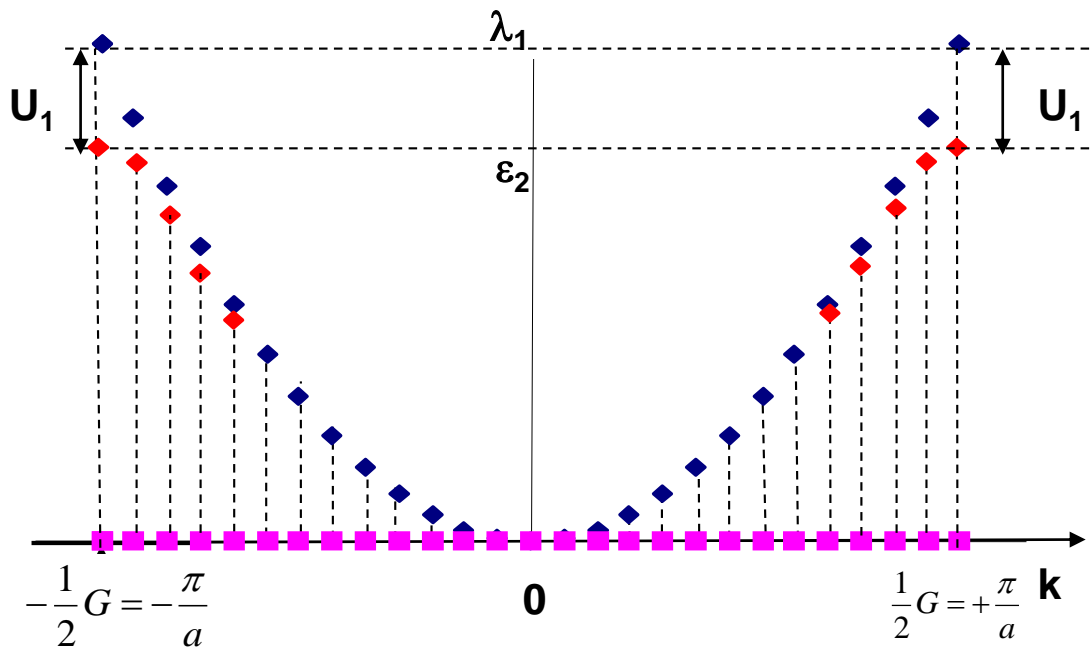
N è in genere molto grande, ad esempio, se a (costante reticolare) = $4\text{\AA} = 4 \cdot 10^{-10}\text{m}$
 ed $L = 4\text{cm}$, allora $N = 10^8$! Per questo si utilizza l'approssimazione del continuo
 nei grafici $\epsilon(k)$.

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

$$\varepsilon_- = \varepsilon_2 + \frac{\hbar^2 \delta^2}{2m} \left(1 - \frac{2\delta}{U_1} \right) \quad \varepsilon_2 = \lambda_1 - U_1$$

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

- ◆ **Elettrone libero**
- ◆ **Elettrone quasi libero**



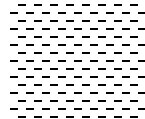
SCHEMA DELLA ZONA ESTESA

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

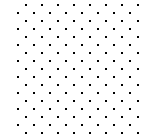
- ◆ Elettrone libero
- ◆ Elettrone quasi libero



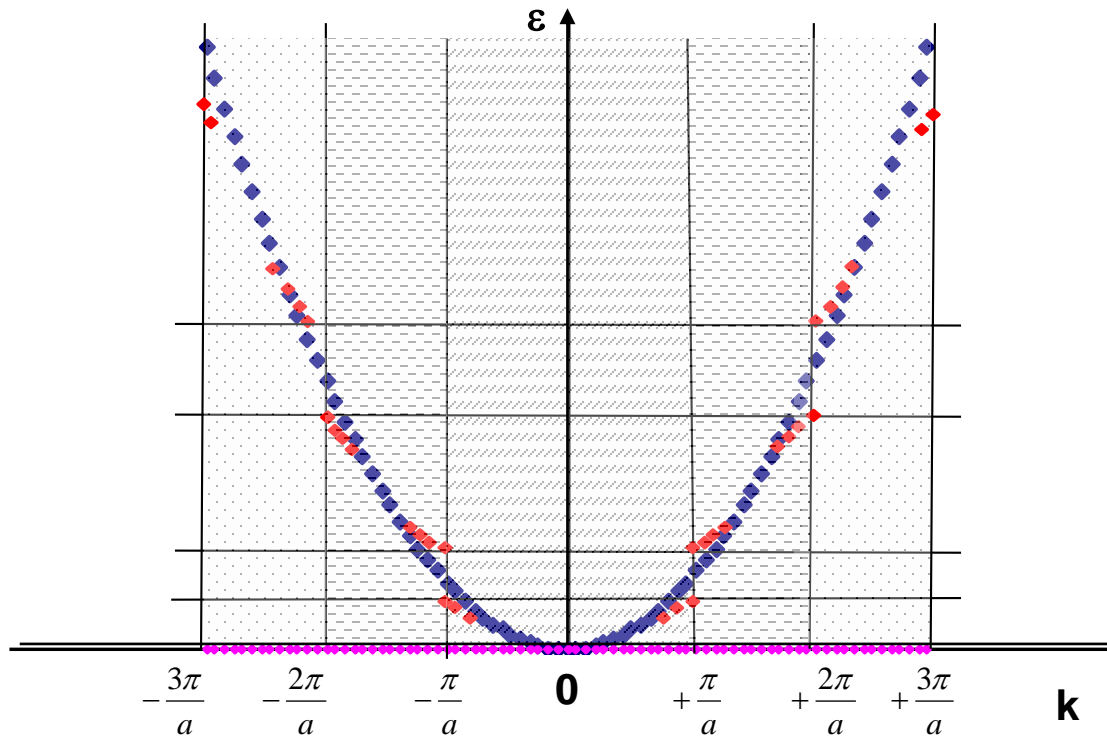
I zona di Brilluoin



II zona di Brilluoin

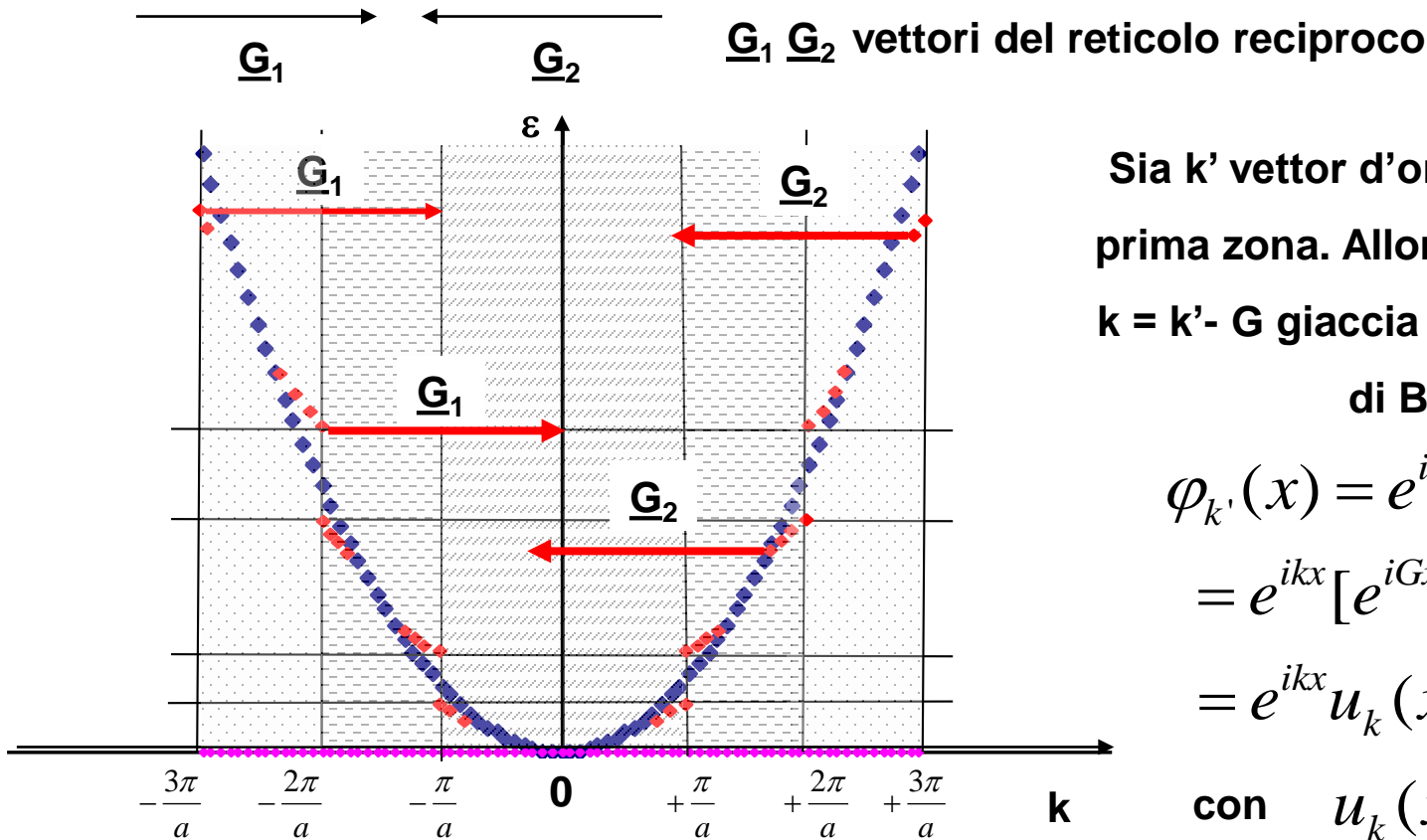


III zona di Brilluoin



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



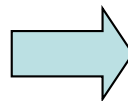
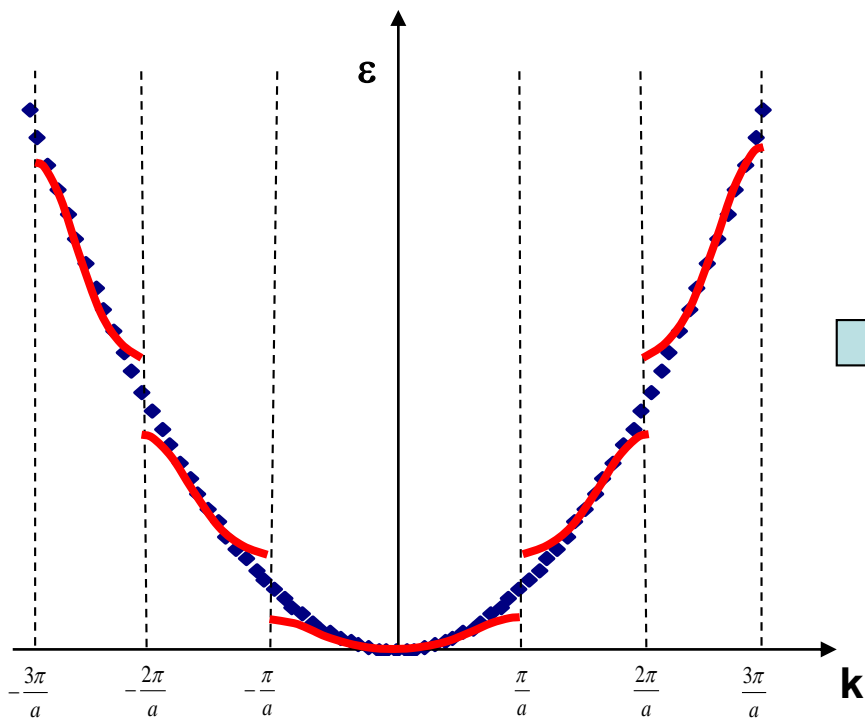
Sia k' vettore d'onda al di fuori della prima zona. Allora esiste G tale che:
 $k = k' - G$ giaccia entro la prima zona di Brillouin

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

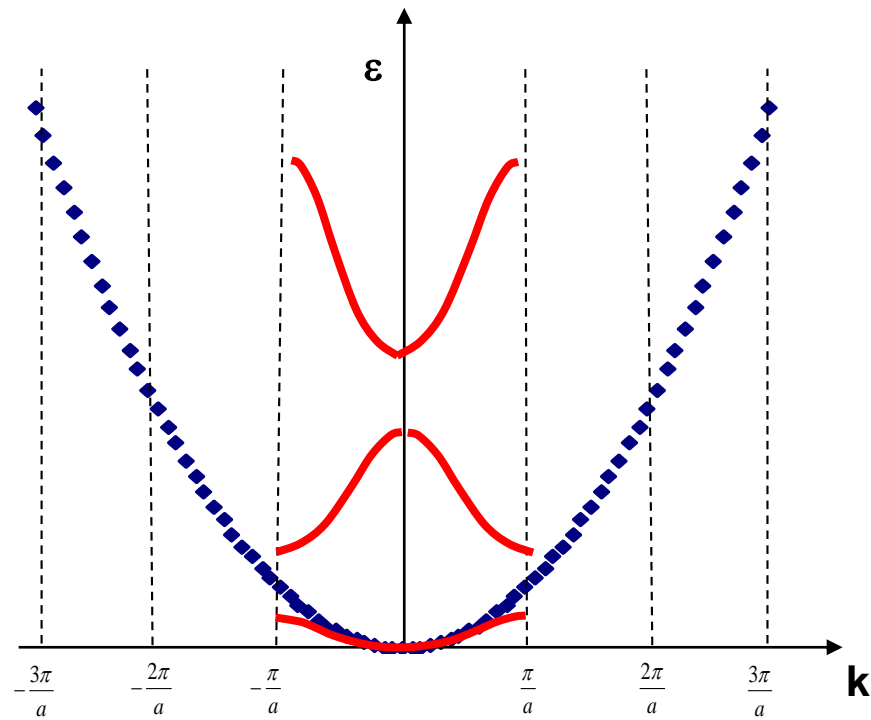
con $u_k(x) = e^{iGx} u_{k'}$

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



Riempimento delle bande: Bande piene e semipiene

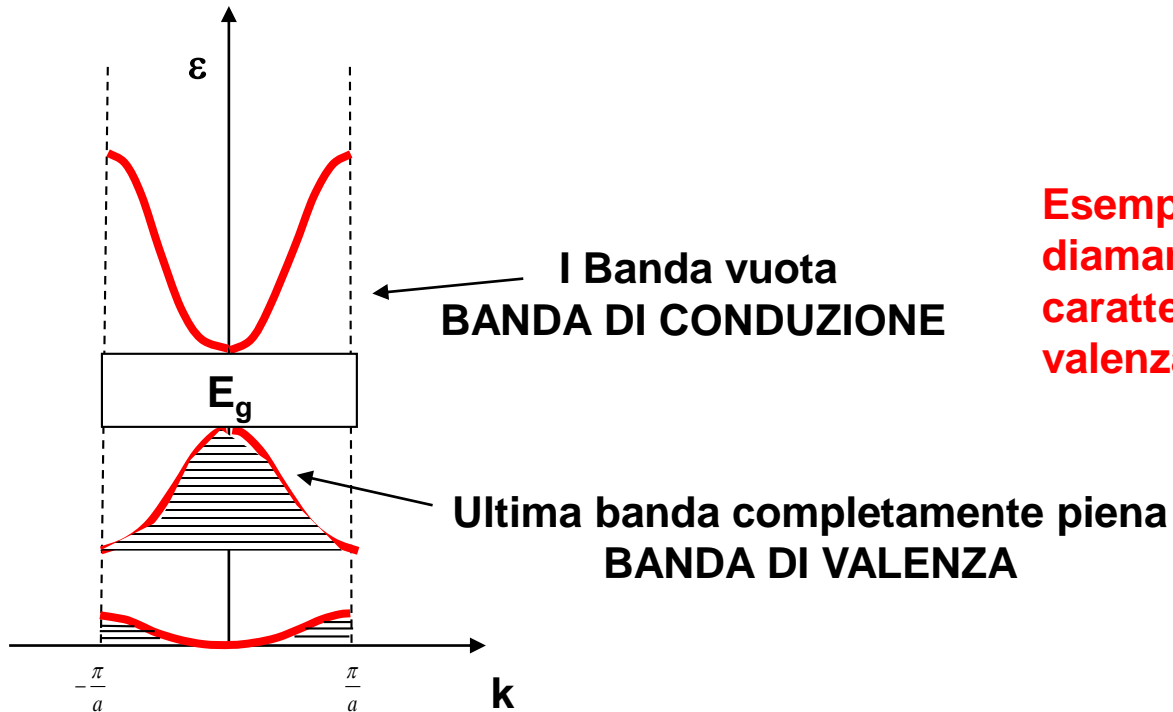
Lo schema della zona ridotta ha portato ad avere n bande di energia $\varepsilon_n(\mathbf{k})$ con \mathbf{k} nella I zona di Brilluoin. Per ogni banda abbiamo visto che vi sono $2N$ stati indipendenti (caratterizzati dal vettore d'onda \mathbf{k} e orientazione di spin per ogni banda di energia) con 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).

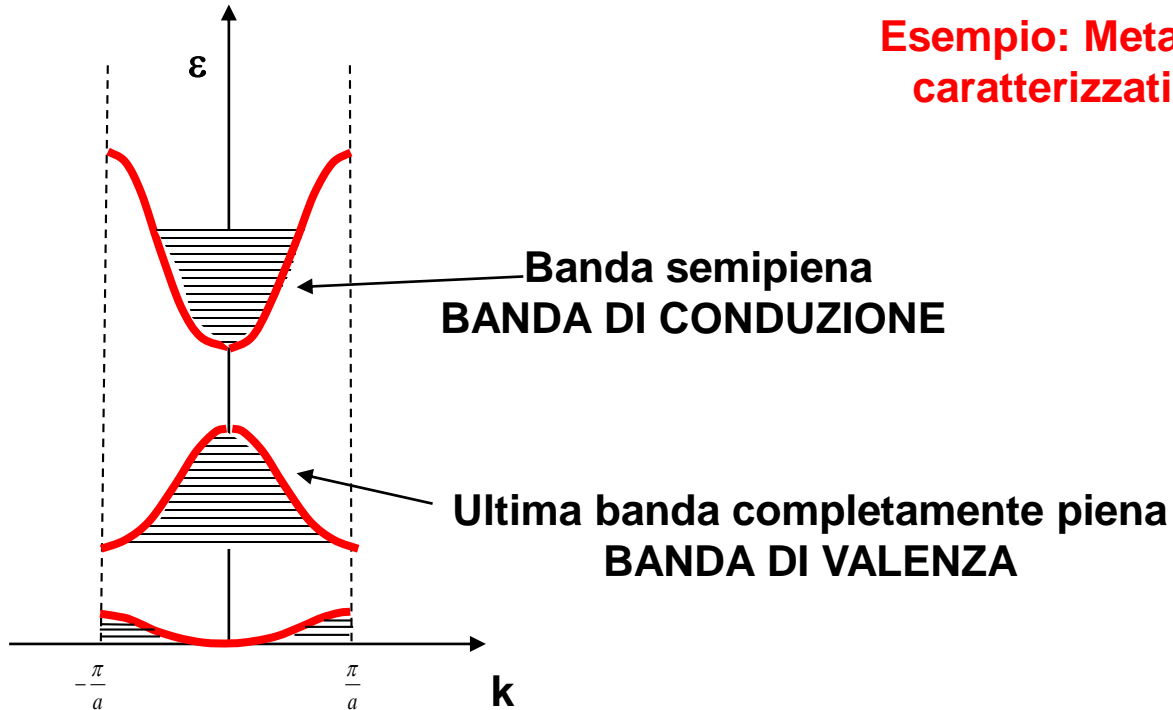


Esempio: semiconduttori quali diamante, silicio germanio, caratterizzati da 8 elettroni di valenza per cella primitiva.

Metalli

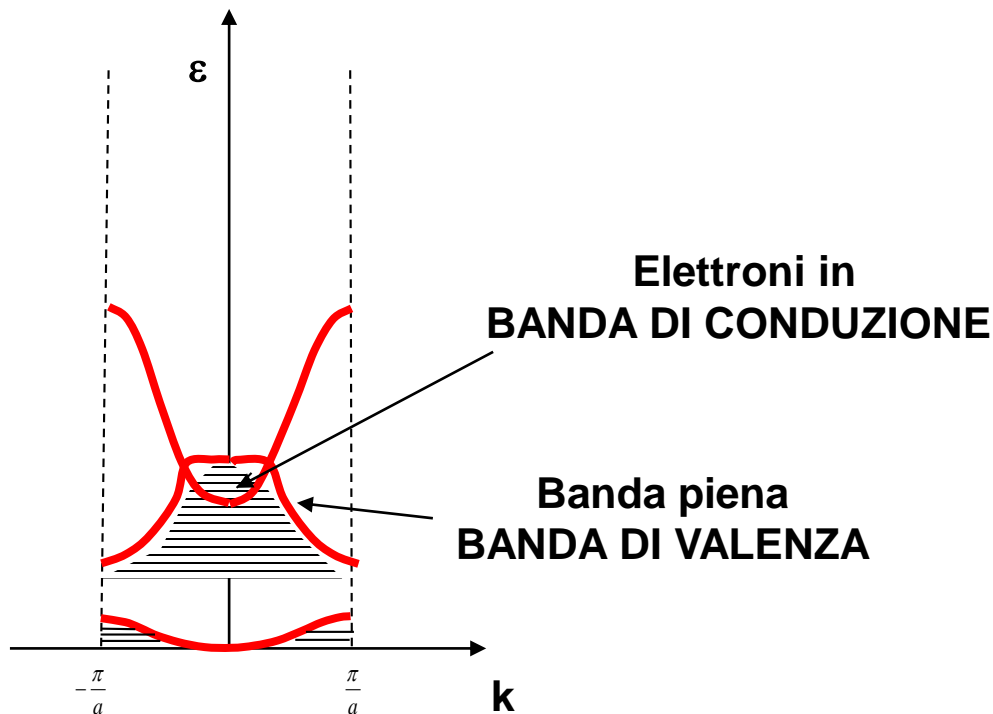
Se a $T = 0$ gli elettroni riempiono NON completamente la banda di energia più elevata il materiale è metallico e l'applicazione di un campo elettrico esterno dà luogo al passaggio di corrente. Tale banda si dice **BANDA DI CONDUZIONE**.

**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.

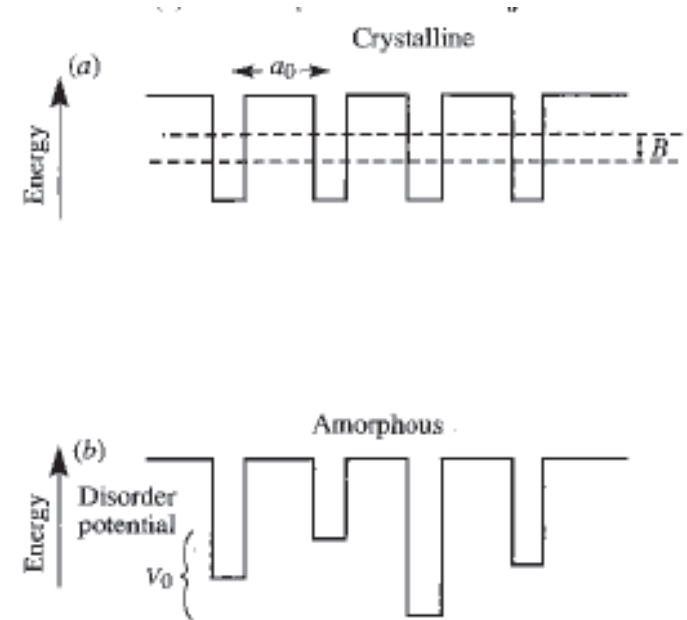


Esempio: metalli delle terre alcaline (shell ns completamente piene e quindi due elettroni di valenza per cella).

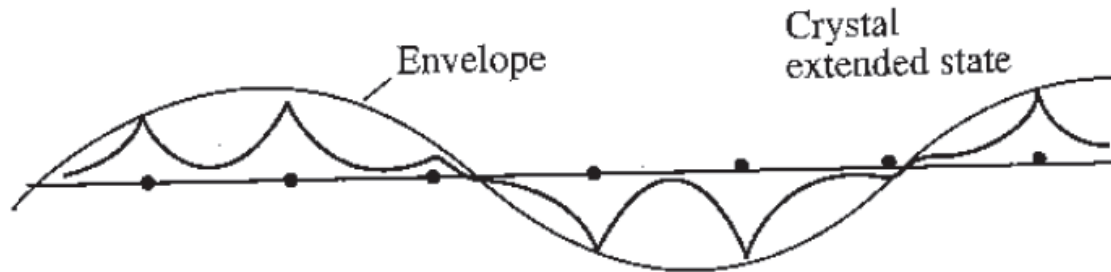
Struttura elettronica dei semiconduttori amorfi

Una delle proprietà fondamentali di un semiconduttore / isolante è la presenza del band gap che separa la banda di valenza occupata da quella di conduzione vuota ($T = 0K$). Dalla teoria del potenziale periodico debole il gap risulta come conseguenza della periodicità della struttura cristallina.

Altri approcci al problema (teoria tight-binding) mostrano che il gap può essere equivalentemente descritto partendo dalla diversità di energia che si attua, instaurando legami covalenti, tra stati leganti (e lone pairs) e stati anti-leganti. Infatti le bande sono soprattutto influenzate dall'ordine a corto raggio, che e' lo stesso nei materiali cristallini ed amorfi, mentre l'assenza di periodicità è da vedersi piuttosto come perturbazione. Se il cristallo perfetto è descritto con un array di buche di potenziale uguali, lo stato amorfo è mostrato come lo stesso array a cui è aggiunto un potenziale casuale con ampiezza media V_0 (modello di Anderson 1958).



Le funzioni d'onda elettroniche in un reticolo periodico sono date dal teorema di Bloch : $\Phi(\underline{r})=u_k(\underline{r}) \exp(i\mathbf{k}\cdot\underline{r})$ dove $u_k(\underline{r})$ ha la periodicità del reticolo. Sussiste quindi una relazione di fase costante fase nei diversi siti reticolari, la funzione d'onda ha un momento ben definito, \mathbf{k} , e si estende attraverso tutto il cristallo.



Le soluzioni dell'equazione di Schroedinger non si applicano al semiconduttore amorfo perché il potenziale qui non è periodico. Un debole potenziale di disordine comporta piccole perturbazioni nella funzione d'onda. L'effetto del disordine nel materiale amorfo è però abbastanza forte da causare uno scattering molto frequente tra stati di Bloch cosicché l'onda perde di coerenza su distanze dell'ordine di uno o due siti reticolari.



Lo scattering causa grande incertezza nel momento elettronico, in pratica dello stesso ordine di k , dato che Δx è pari alla costante reticolare a

$$\Delta x \Delta p \approx h \quad \rightarrow \quad \Delta k \approx \frac{2\pi}{\Delta x} \approx \frac{2\pi}{a} \approx k$$

Per questo il momento k nel materiale amorfo non è un numero valido per la quantizzazione ed esso non si conserva nelle transizioni elettroniche.

La perdita della conservazione del momento k è uno dei risultati più rilevanti del disordine reticolare. Alcune conseguenze sono:

- 1) Le bande di energia non vengono più descritte dalle relazioni di dispersione ε, k ma in termini di distribuzione delle densità di stati $N(\varepsilon)$. Le masse efficaci di elettroni e lacune devono essere ridefinite.**
- 2) Si perde la distinzione tra gap diretto e indiretto . Le transizioni possibili sono quelle che avvengono tra stati che si sovrappongono nello spazio reale**
- 3) Il disordine riduce la mobilità dei portatori a causa del frequente scattering producendo un profondo effetto di localizzazione delle funzioni d'onda.**