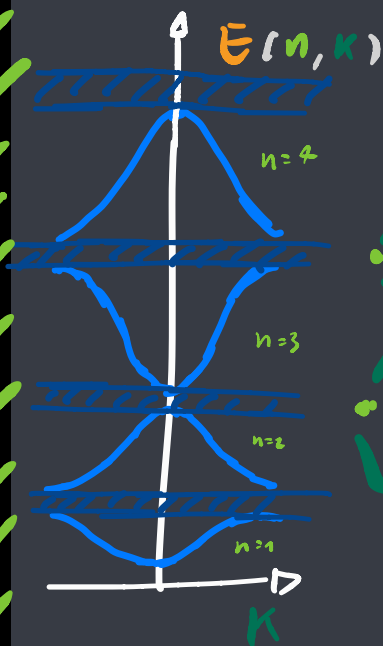


Fisica dello Stato Solido



$$|n, \vec{k}\rangle = e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} \psi_n(\vec{x})$$

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \sum_{\vec{r}_i} \frac{e^2 z}{|\vec{E}_i - \vec{r}|}$$

$$\hat{H} |n, \vec{k}\rangle = E(n, \vec{k}) |n, \vec{k}\rangle$$

$$[H, \vec{E}_i] = 0$$

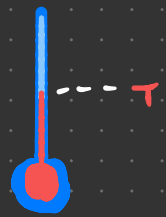
Università di Pisa

A.A. 2019-2020

Francesco Sacco

francesco215@live.it

Distribuzioni Termodinamiche



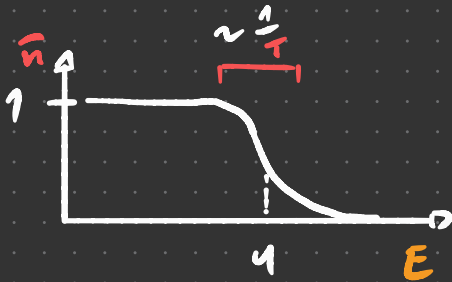
Boltzmann $\sim e^{-\frac{(E-u)}{k_B T}}$

Fermi
Dirac

VS

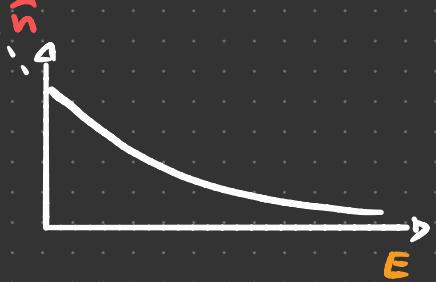
Bose
Einstein

$$\bar{n} = \frac{1}{e^{\frac{(E-u)}{k_B T}} + 1}$$



Ricordarsi che nel
lim $T \rightarrow 0$ deve
diventare un
gradino centrato
in μ

$$\bar{n} = \frac{1}{e^{\frac{(E-u)}{k_B T}} - 1}$$



Ricordarsi che c'è un
asintoto per le energie
negative e che se
se $T \rightarrow 0$ non deve
diventare un gradino

Come Funzionano i Solidi

Se vogliamo scrivere l'Hamiltoniana completa di un solido essa risulta

$$\hat{H} = \overbrace{\sum_{e_i} \frac{p^2}{2m_e} + \sum_{A_i} \frac{p^2}{2m_A}}^{\text{Energie cinetiche di Elettroni e Atomi}} + \overbrace{\sum_{e_i, e_j} \frac{e^2}{|\vec{r}_{e_i} - \vec{r}_{e_j}|}}^{\text{Potenziale repulsivo degli elettroni}} + \underbrace{\sum_{A_i \neq A_j} \frac{z_{A_i} z_{A_j} e^2}{|\vec{r}_{A_i} - \vec{r}_{A_j}|}}_{\text{Potenziale repulsivo degli Atomi}} - \underbrace{\sum_{e_i, A_j} \frac{z_{A_j} e^2}{|\vec{r}_{e_i} - \vec{r}_{A_j}|}}_{\text{Potenziale attrattivo tra elettroni e Atomi}}$$

Questa Hamiltoniana non è risolvibile analiticamente, quindi si fanno delle approssimazioni

Una prima approssimazione che si può fare è quella di Born-Oppenheimer.

Il ragionamento che sta dietro è questo: gli **elettroni** sono ≈ 1000 volte più leggeri degli **Atomi**, ma hanno comunque in media la stessa energia **Energia**, quindi si ha che gli elettroni sono più veloci degli atomi ($v_e \approx 30 \sqrt{Z} v_A$).

A questo punto possiamo calcolarci lo stato fondamentale degli elettroni considerando gli atomi fermi.

$$H_e(\{\vec{r}_{A_i}\}) = \sum_{e_i} \frac{p_i^2}{2m_e} - \sum_{e_i, A_j} \frac{z_{A_j} e^2}{|\vec{r}_{e_i} - \vec{r}_{A_j}|} + \sum_{e_i, e_j} \frac{e^2}{|\vec{r}_{e_i} - \vec{r}_{e_j}|}$$

Una volta calcolato lo stato fond. $|0\rangle$ si calcola $E_0 = \langle 0 | H_e | 0 \rangle$ e l'Ham. degli Atomi diventa

$$H_A = \sum_{A_i} \frac{p_i^2}{2m_A} + \sum_{A_i, A_j} \frac{z_{A_i} z_{A_j} e^2}{|\vec{r}_{A_i} - \vec{r}_{A_j}|} + E_0(\{\vec{r}_{A_i}\})$$

Concentriamoci sull'Hamiltoniana degli elettroni: $\equiv h_i$

$$H_e = \sum_{e_i} \frac{p_i^2}{2m_e} - \underbrace{\sum_{e_i, A_s} \frac{z_{A_s} e^2}{|\vec{r}_{e_i} - \vec{r}_{A_s}|}}_{\equiv V_{\text{nuc}}(\vec{r}_i)} + \underbrace{\sum_{e_i, e_j} \frac{e^2}{|\vec{r}_{e_i} - \vec{r}_{e_j}|}}_{\equiv \sum_{j \neq i} \frac{e^2}{r_{ij}}}$$

$$H_e = \sum_i \frac{p_i^2}{2m_e} + V_{\text{nuc}}(\vec{r}_i) + \sum_{j \neq i} \frac{e^2}{r_{ij}}$$

La funzione d'onda di tutti gli elettroni

$|\Psi\rangle = |\psi_1\rangle |\psi_2\rangle \dots |\psi_N\rangle$, in teoria va antisimmetrizzato, ma facciamo prima a sceglierne una che lo è già, cioè $|\psi_1\rangle |\psi_2\rangle \dots |\psi_N\rangle = \sum_{i_1, i_2, \dots, i_N} \epsilon_{i_1, i_2, \dots, i_N} |\psi_{i_1}\rangle |\psi_{i_2}\rangle \dots |\psi_{i_N}\rangle$

L'operatore h_i agisce solo sull' i -esimo elettrone, quindi

$$\langle \Psi | h_i | \Psi \rangle = \langle \psi_1 | \psi_1 \rangle \dots \langle \psi_i | h_i | \psi_i \rangle \dots \langle \psi_N | \psi_N \rangle = \langle \psi_i | h_i | \psi_i \rangle$$

Il secondo pezzo d'Hamiltoniana agisce su due elettroni diversi.

Nel caso di prima se l'Ham. non era antisimmetrica non cambiava niente, ora sí,

$$\langle \Psi | \frac{e^2}{r_{ij}} | \Psi \rangle = \text{(cont. palloni)}$$

$$\frac{1}{2} \left[\langle \psi_i | \langle \psi_j | \frac{e^2}{r_{ij}} | \psi_i \rangle | \psi_j \rangle - \langle \psi_i | \langle \psi_j | \frac{e^2}{r_{ij}} | \psi_j \rangle | \psi_i \rangle \right]$$

da ora in poi indicherò con $|i\rangle \equiv |\psi_i\rangle$ e $|ij\rangle \equiv |\psi_i\rangle |\psi_j\rangle$

$$\langle \Psi | H_e | \Psi \rangle =$$

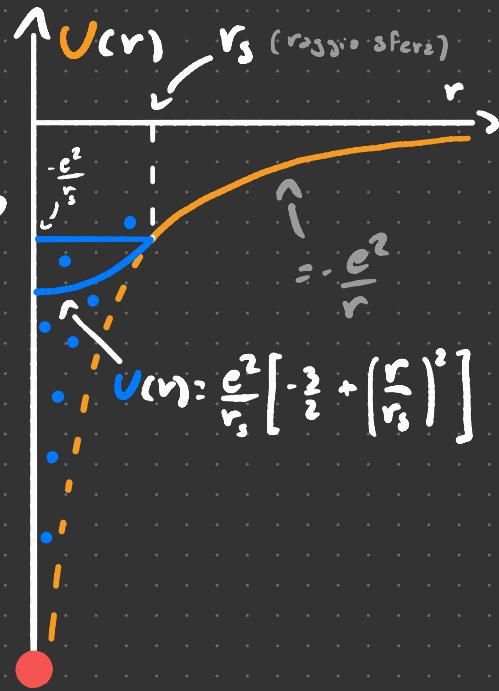
$$= \sum_i \langle i | h_i | i \rangle + \sum_{j>i} \left[\langle ij | \frac{e^2}{r_{ij}} | ij \rangle - \langle ij | \frac{e^2}{r_{ij}} | ji \rangle \right]$$

$\equiv G(\{i\})$ ← Questo è un funzionale, quindi basta usare il metodo variazionale per trovare il minimo (stato fondamentale)

Approssimazione di singolo Elettrone

La fisica tende a diventare brutta quando si inizia a parlare di sistemi a più di due corpi, quindi ci tocca inventare qualcosa per evitare di trovarci nel casino delle pagine prima.

Alla stato Fondamentale gli elettroni si vanno a mettere attorno agli atomi del reticolo e finiscono per schermarlo. Questo va a creare un potenziale effettivo. La scelta del potenziale giusto è più un'arte che una scienza, quindi si finisce per scegliere dei potenziali come quelli in figura.



Densità di Stati

La densità di stati D indica quanti stati ci sono in una determinata zona dello spazio delle fasi, cioè quante "cellette" sono disponibili.

Essa si può indicare così:

$$D(E) = 2 \sum_{\vec{r}} \delta(E(\vec{r}) - E)$$

Questo sta a significare che per ogni \vec{r} c'è uno stato e questo stato contribuisce a $D(E)$ quando $E = E(\vec{r})$ (moltiplicato per 2 a causa dello spin).

Se \vec{r} assume valori continui allora

$$D(E) = 2V \int \delta(E(\vec{r}) - E) \frac{d\vec{r}}{(2\pi)^{\text{Dim}}}$$

Sarebbe ottimo sbarazzarsi dell' δ

$$\delta(F(\vec{x})) dF = \delta(F(\vec{x})) |\vec{\nabla} F| d\vec{x}$$

$$\frac{\delta(F(\vec{x})) dF}{|\vec{\nabla} F|} = \delta(F(\vec{x})) d\vec{x} \Rightarrow \int \delta(F(\vec{x})) d\vec{x} =$$

$$= \int \frac{\delta(F(\vec{x})) dF}{|\vec{\nabla} F(\vec{x})|} = \sum_{z \text{ veri}} \frac{1}{|\vec{\nabla} F(\vec{x})|} = \int_{F=0} \frac{d\vec{x}}{|\vec{\nabla} F(\vec{x})|}$$

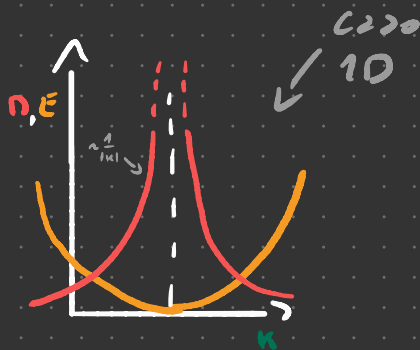
$$\int \delta(F(\vec{x})) d\vec{x} = \int_{F=0} \frac{d\vec{x}}{|\vec{\nabla} F(\vec{x})|}$$

$$D(E) = \int_{E(\vec{k})=E} \frac{2V d\vec{k}}{|\nabla_{\vec{k}} E(\vec{k})| (2\pi)^{Dim}} \quad \nabla_{\vec{k}} \equiv \nabla$$

Questa formula prevede che ci siano cose severe quando $\nabla E = 0$

In generale i punti di minimo si possono sviluppare al secondo ordine

$$E(\vec{k}) = E_c + \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$$



Partiamo dal caso 1D

$$\nabla E = \frac{\hbar^2 k}{2m}$$

IMPRECISO

Nel caso 2D conviene calcolare direttamente l'integrale

$$\frac{S}{(2\pi)^2} \int \delta \left[E_c + \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2) - E \right] dk_x dk_y = \left| q_i \equiv \frac{\hbar k_i}{\sqrt{2m}} \right.$$

$$= \frac{S m}{\pi^2 \hbar^2} \int \delta [E_c + q_x^2 + q_y^2 - E] dq_x dq_y$$

Questo integrale può avere due valori diversi a seconda dei casi:

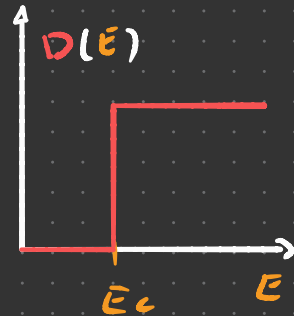
Caso 1: segno concorde

Passo in Sferiche

$$D(E) = \frac{2mS}{\pi \hbar^2} \int \delta[E_c + q^2 - E] q dq =$$

$$= \frac{mS}{\pi \hbar^2} \int \delta[q^2 - (E - E_c)] dq^2 =$$

$$= \frac{mS}{\pi \hbar^2} \Theta(E_c - E) \quad \rightarrow$$



Caso 2: segno discorde

$$D(E) = \frac{Sm}{\pi^2 \hbar^2} \int \delta[q_x^2 - (E + q_y^2 - E_c)] dq_x dq_y$$

$$= \frac{Sm}{\pi^2 \hbar^2} \int \frac{1}{\sqrt{E - q_y^2 - E_c}} \frac{dq_y}{4}$$

Nel libro non c'è il 4

Teorema de l'accelerazione

noi sappiamo
che gli auto stati
de l'Hamiltoniana
sono tutti così

$$|n, \vec{k}\rangle = e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \psi_n(\vec{x})$$
$$\hat{H} = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{x})$$

↖ Periodico

$$\vec{p}|n, \vec{k}\rangle = -i\hbar \vec{\nabla} [e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \psi_n(\vec{x})] =$$

$$= [\hbar \vec{k} \psi_n(\vec{x}) - i\hbar \vec{\nabla} \psi_n(\vec{x})] e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}$$

$$= e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} (\vec{p} + \hbar \vec{k}) \psi_n(\vec{x})$$

da questo ne
consegue che

$$\langle n, \vec{k} | \frac{p^2}{2m} + V(\vec{x}) | n, \vec{k} \rangle =$$

$$= \langle \psi_n | \left(\frac{(\vec{p} + \hbar \vec{k})^2}{2m} + V(\vec{x}) \right) | \psi_n \rangle = E(\vec{k})$$

derivo questa formula rispetto a \vec{k}

$$\frac{\partial E(\vec{k})}{\partial \vec{k}} = \langle u_n | \frac{\partial}{\partial \vec{k}} (\vec{p} + \hbar \vec{k}) | u_n \rangle =$$
$$\hbar \langle u_n, \vec{k} | \frac{\vec{p}}{\hbar} | u_n, \vec{k} \rangle = \vec{v}(\vec{k})$$

Quindi si ottiene l'importante equazione che dice che

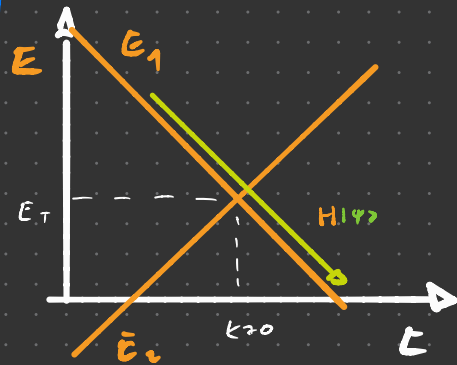
$$\frac{\partial E(\vec{k})}{\partial \hbar \vec{k}} = \vec{v}(\vec{k})$$

$$dE = \vec{F} \cdot \vec{v} dt = \vec{F} \cdot \frac{\partial E(\vec{k})}{\partial \hbar \vec{k}} dt$$

Visto che l'Energia è un differenziale esatto abbiamo che

$$\vec{F} = \frac{d \hbar \vec{k}}{dt}$$

Tunneling di Zener



$$H(t) = \begin{vmatrix} E_1(t) & 0 \\ 0 & E_2(t) \end{vmatrix}$$

$$\psi(t=-\infty) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{Voglio calcolare } \psi(t=+\infty)$$

$$H\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

$$\psi(t) = \begin{vmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \end{vmatrix}$$

$$\langle 1 | H | \psi \rangle = i\hbar \frac{\partial c_1}{\partial t} = c_1 E_1(t)$$

Suppongo che

$$\begin{cases} E_1(t) = t E_1' + E^T \\ E_2(t) = t E_2' + E^T \\ E_1' = -E_2' \end{cases}$$

← negativo

$$\begin{cases} \frac{\partial c_2}{\partial t} = \frac{c_2}{i\hbar} (t E_2' + E^T) \\ \frac{\partial c_1}{\partial t} = \frac{c_1}{i\hbar} (-t E_2' + E^T) \end{cases}$$

$$\int \frac{dC_1}{C_1} = \int \frac{i}{\hbar} (t E_2' - E^T) dt$$

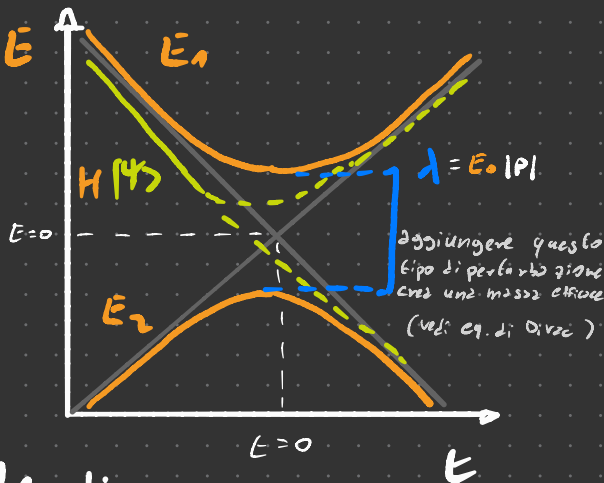
$$\ln \left(\frac{C_1(t)}{C_1(t=0)} \right) = \frac{i}{\hbar} \left[\frac{E_2^2}{2} t - E^T t \right]$$

$$C_1(t) = C_1(t=0) \exp \left[\frac{i}{\hbar} t \left(\frac{E_2^2}{2} - E^T \right) \right]$$

$|C_1(t)|^2 = 1$ Quindi una particella non passa da una coordinata all'altra.

Adesso supponiamo che le energie siano tipo così

$$H = E_0 \begin{vmatrix} t & p^x \\ p & -t \end{vmatrix}$$



Nel limite in cui le linee
 2) rannocioni tendono a quelle grigie ci
 aspettiamo che la transizione sia identica
 a quella tra E_2 e E_1 prima

$$\begin{cases} \frac{\partial c_1}{\partial t} = t E_0 c_1 + E_0 P c_2 \\ \frac{\partial c_2}{\partial t} = -t E_0 c_2 + E_0 P^* c_1 \end{cases}$$

$$\det \begin{pmatrix} t E_0 - \lambda & E_0 P \\ E_0 P^* & -t E_0 - \lambda \end{pmatrix} = 0 \quad -t^2 \frac{\lambda^2}{E_0^2} + |P|^2 = 0 \quad \frac{\lambda^2}{E_0^2} = t^2 - |P|^2$$

$$\lambda = \pm E_0 \sqrt{t^2 - |P|^2}$$

λ_1 e λ_2 sono le componenti lungo gli 2a e 3a assi dell'Hamiltoniano.

$$E_0 \begin{vmatrix} t & P^* \\ -t & -t \end{vmatrix} \begin{vmatrix} c_1 \\ c_2 \end{vmatrix} = E_0 \sqrt{t^2 - |P|^2} \begin{vmatrix} c_1 \\ c_2 \end{vmatrix} \quad \begin{cases} \frac{\partial z_1}{\partial t} = \frac{E_0 \sqrt{t^2 - |P|^2}}{i \hbar} z_1 \\ \frac{\partial z_2}{\partial t} = -\frac{E_0 \sqrt{t^2 - |P|^2}}{i \hbar} z_2 \end{cases}$$

$$z_1(t \rightarrow +\infty) = e^{-\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{E_0 \sqrt{t^2 - |P|^2}}{i \hbar} dt} = e^{-\frac{E_0 |P|^3}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sqrt{t^2 - 1}}{|P|^2} \frac{dt}{|P|}} = e^{-\frac{E_0 |P|^3}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \sqrt{x^2 - 1} dx} =$$

$$= e^{-\frac{E_0 |P|^3}{\hbar} \int_{-1}^{+1} \sqrt{1-x^2} dx} =$$

$$\left[\begin{aligned} \text{noi sappiamo che } \int \sqrt{1-x^2} dx &= \\ &= \frac{x}{2} \sqrt{1-x^2} + \frac{\arcsin(x)}{2} \text{ per } -1 \leq x \leq 1 \end{aligned} \right]$$

$$= e^{-\frac{E_0 |P|^3}{\hbar} \int_{-1}^{+1} \sqrt{1-x^2} dx} = e^{-\frac{E_0 |P|^3}{\hbar} \int_{-1}^0 \sqrt{1-x^2} dx} e^{-\frac{2 E_0 |P|^3}{\hbar} \int_0^1 \sqrt{1-x^2} dx}$$

Parte reale Parte imm.

La parte reale è l'unica a contribuire all'ampiezza di probabilità, quindi ci limiteremo a usare quella.

$$\Rightarrow |Z_1|^2 = e^{\frac{\pi E_0 |P|^3}{\hbar}}$$

$$P_T = e^{\frac{\pi E_0 |P|^3}{\hbar}}$$

$$P_R = 1 - P_T$$

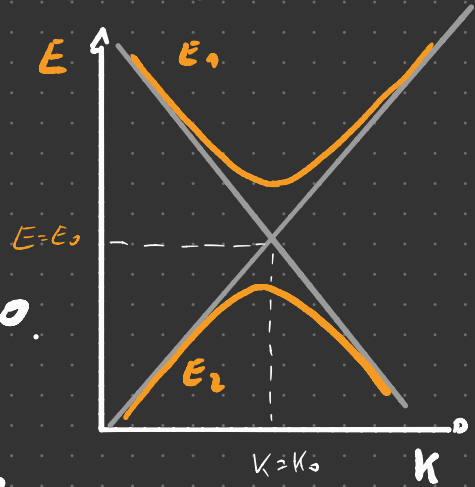
Caso Reticolare

Questo si può usare per capire come cambia l'energia di una particella sotto una forza esterna in un potenziale periodico.

Visto che $\hbar \vec{k} = \vec{F}$, se

\vec{F} è costante nel tempo

possiamo dire che $\vec{k} = \frac{t}{\hbar} \vec{F}$, che equivale a riscrivere gli assi del problema precedente



L'Hamiltoniana

$$\vec{H} \cdot \vec{P}$$

$$\begin{aligned} H|n, \vec{k}\rangle &= \left[\frac{p^2}{2m} + V(\vec{x}) \right] e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} u_n(\vec{x}) \\ &= e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} \left[\frac{(\vec{p} + \hbar\vec{k})^2}{2m} + V(\vec{x}) \right] u_n(\vec{x}) \end{aligned}$$

Il fattore di fase $e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}}$ non viene più operato dall'Hamiltoniana

$$H(\vec{k}) \equiv \left[\frac{(\vec{p} + \hbar\vec{k})^2}{2m} + V(\vec{x}) \right] \quad |n\rangle \equiv |n, \vec{0}\rangle = u_n(\vec{x})$$

$H(\vec{k})|n\rangle = E_n(\vec{k})|n\rangle$ Avere un H2m.

scritta così presenta il vantaggio che ora la matrice è di dimensione numerabile e il \vec{k} rientra come parametro

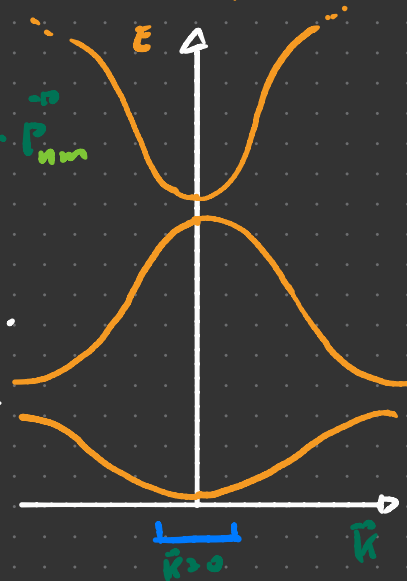
$$\left(\frac{\vec{p} + \hbar \vec{k}}{2m} \right)^2 = \frac{p^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{\hbar}{m} \vec{k} \cdot \vec{p}$$

$$E_n \equiv E(n, \vec{0})$$

$$H(\vec{k}) = \frac{1}{2m} \left[p^2 + \hbar^2 k^2 + V(\vec{x}) \right] + \frac{\hbar}{m} \vec{k} \cdot \vec{p}$$

$$H(\vec{k}) |n\rangle = \left[E_n + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right] |n\rangle + \frac{\hbar}{m} \vec{k} \cdot \vec{p} |n\rangle = E(n, \vec{k}) |n\rangle$$

$$H_{nm}(\vec{k}) = \left[E_n + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right] \delta_{nm} + \frac{\hbar}{m} \vec{k} \cdot \vec{p}_{nm}$$



Fin qui tutto è esatto.

Una cosa che si potrebbe fare è restringersi a piccoli \vec{k} .

Visto che $p_{nm} \rightarrow 0$ (l'elettrone ha

velocità nulla) possiamo evitare $-\frac{\hbar}{m} \vec{k} \cdot \vec{p}_{nm}$

Come una perturbazione a 1 secondo ordine

$$E(n, \vec{k}) \approx E_n + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \left(\frac{\hbar}{m} \right)^2 \sum_{n' \neq n} \frac{| \langle n | \vec{k} \cdot \vec{p} | n' \rangle |^2}{E_n - E_{n'}}$$

La relazione di dispersione è quadratica in \vec{k} per $\vec{k} \rightarrow 0$. Per indicare quanto è larga o stretta la parabola si usa il tensore di massa efficace

$$|\langle n | \vec{k} \cdot \vec{p} | n' \rangle|^2 = \sum_{a,b} (\vec{k}^a \cdot \vec{p}_{nn'}^a)^+ \vec{p}_{nn'}^b \cdot \vec{k}^b$$

$\frac{1}{m^2} \frac{\vec{p}_{nn'}^a \vec{p}_{nn'}^b}{E_n - E_{n'}}$ è un tensore che viene moltiplicato a destra e a sinistra da \vec{k} che crea una forma quadratica.

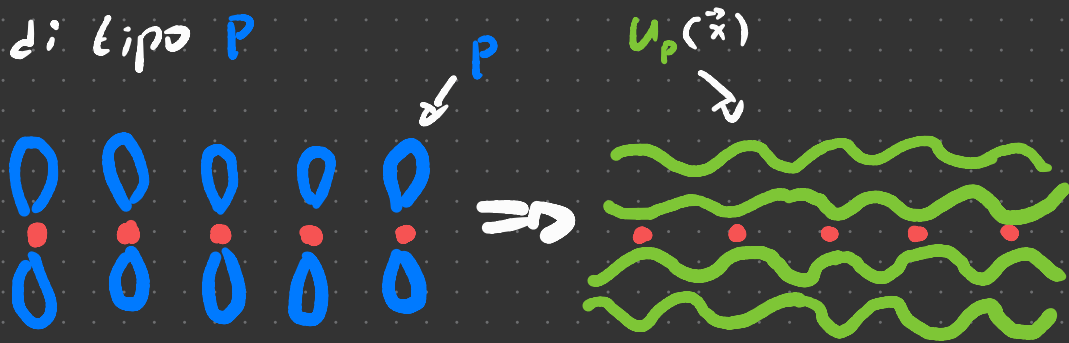
Se lo moltiplico per $2m$ e gli sommo l'identità ottengo che

$$\left(\frac{m}{m^*} \right)_{ab} = \delta_{ab} + \sum_{\vec{k}} \frac{\vec{p}_{nn'}^a \vec{p}_{nn'}^b}{E_n - E_{n'}}$$

$$\vec{E}(n, \vec{n}) = E_n + \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\vec{k}} \vec{k}^a \left(\frac{m}{m^*} \right)_{ab} \vec{k}^b$$

TIGHT BINDING

È possibile provare a indovinare le funzioni periodiche $u_n(\vec{x})$ sommando gli orbitali atomici. Nella figura qui sotto si vede quello che succede quando sommi tanti orbitali di tipo P



$$u_i(\vec{x}) \approx \sum_{\epsilon_m} \phi_i(\vec{r} - \vec{E}_m)$$

La funzione d'onda sarà quindi tipo così

A dire il vero bisognerebbe includere i termini di fase per gli autovalori a $\vec{k} \neq 0$, quindi

$$\Phi_i(\vec{k}, \vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\epsilon_m} e^{i\vec{k} \cdot \vec{E}_m} \phi_i(\vec{x} - \vec{E}_m)$$

A questo punto si cercano gli auto stati dell'Hamiltoniano rispetto agli Φ

$$H_{ij}(\vec{n}) \equiv \langle \Phi_i(\vec{n}) | H | \Phi_j(\vec{n}) \rangle = \\ = E \langle \Phi_i(\vec{n}) | \Phi_j(\vec{n}) \rangle \equiv E S_{ij}(\vec{n})$$

$$\text{Det} [H_{ij}(\vec{n}) - E S_{ij}(\vec{n})] = 0$$

$$H_{ij} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{t}_1, \vec{t}_2} e^{i \vec{n} \cdot (\vec{t}_2 - \vec{t}_1)} \langle \phi_i(\vec{x} - \vec{t}_1) | H | \phi_j(\vec{x} - \vec{t}_2) \rangle \\ = \sum_{\vec{t}} e^{i \vec{n} \cdot \vec{t}} \langle \phi_i(\vec{x}) | H | \phi_j(\vec{x} - \vec{t}) \rangle =$$

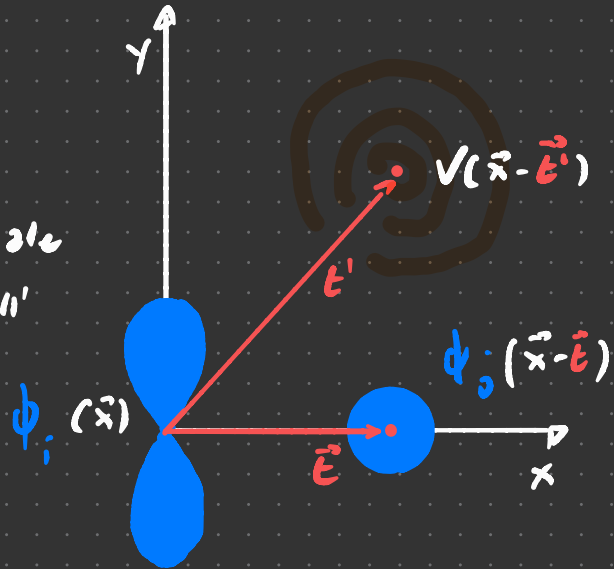
$$\sum_{\vec{t}} e^{i \vec{n} \cdot \vec{t}} \langle \phi_i(\vec{x}) | \frac{p^2}{2m} | \phi_j(\vec{x} - \vec{t}) \rangle + \left. \begin{array}{l} \text{potenziale} \\ \text{del singolo} \\ \text{Atomo} \end{array} \right\}$$

$$\sum_{\vec{t}, \vec{t}'} e^{i \vec{n} \cdot \vec{t}} \langle \phi_i(\vec{x}) | V_s(\vec{x} - \vec{t}) | \phi_j(\vec{x} - \vec{t}') \rangle$$

Questa Matrice è bella complicata da calcolare, quindi si fanno delle approssimazioni

Se $\vec{E} = \vec{E}' = 0$ la matrice
 F_2 $E_i \delta_{ij}$ dove E_i è
 l'energia del singolo orbitale
 i -esimo e contribuisce all'
 ordine zero.

Se $\vec{E} \neq \vec{E}' \neq 0$ il
 contributo è molto
 piccolo e può essere
 ignorato.



Il contributo con l'ordine più grande dopo
 il caso $\vec{E} = \vec{E}' = 0$ è quello in cui $\vec{E} = \vec{E}' \neq 0$
 oppure $\vec{E}' = 0 \neq \vec{E}$, quindi:

$$\langle \psi_i(\vec{x}) | V_j(\vec{x} - \vec{E}') | \psi_j(\vec{x} - \vec{E}) \rangle \simeq$$

$$\simeq \langle \psi_i(\vec{x}) | V_j(\vec{x} - \vec{E}) | \psi_j(\vec{x} - \vec{E}) \rangle (\delta_{EE} + \delta_{E'0})$$

è possibile approssimare ulteriormente
 limiti facendo E e E' alle celle vicine l'origine.
 Di solito questi tipi di valori sono
 tabulati.

Dinamica dei Solidi

Nella sezione in cui si parlava di come funzionano i solidi abbiamo lasciato in sospeso la risoluzione dell'Hamiltoniana degli Atomi

$$H_A = \sum_{A_i} \frac{p^2}{2m_{A_i}} + \sum_{A_i \neq A_j} \frac{z_{A_i} z_{A_j} e^2}{|\vec{r}_{A_i} - \vec{r}_{A_j}|} + E_0(\{\vec{r}_{A_i}\}) =$$

$$H_A = \sum_{A_i} \frac{p^2}{2m_{A_i}} + E_0(\{\vec{r}_{A_i}\}) \quad \uparrow \equiv E_0(\{\vec{r}_{A_i}\})$$

$$m_{A_i} \ddot{\vec{r}}_{A_i} = - \frac{\partial E_0(\{\vec{r}_{A_i}\})}{\partial \vec{r}_{A_i}}$$

Ho usato l'equazione di Hamilton per passare dall'Ham. all'eq. del Moto per avere una descrizione Classica

A questo punto sviluppiamo l'energia per avere le piccole oscillazioni;

$$E_0(\{\vec{r}_{A_i}\}) = E_0|_{\min} + \sum_{A_i, A_j} \frac{\partial^2 E_0}{\partial \vec{r}_{A_i} \partial \vec{r}_{A_j}} \bigg|_{\min} \vec{r}_{A_i} \vec{r}_{A_j}$$

$$m_{A_i} \ddot{\vec{r}}_{A_i} = - \sum_{A_j} \frac{\partial^2 E_0}{\partial \vec{r}_{A_i} \partial \vec{r}_{A_j}} \Big|_{\min} \vec{r}_{A_j}$$

Diagonalizzando questa matrice si trovano i modi normali.

$$\omega^2 m_{A_i} \vec{r}_{A_i} = \sum_{A_j} \frac{\partial^2 E_0}{\partial \vec{r}_{A_i} \partial \vec{r}_{A_j}} \Big|_{\min} \vec{r}_{A_j}$$

Tutto questo ragionamento è possibile solo se E_0 non è degenere nella zona d'interesse, senò è un casino

Dalora in poi indicheremo con $i \equiv A_i$ e $D_{ij} \equiv \frac{\partial^2 E_0}{\partial \vec{r}_{A_i} \partial \vec{r}_{A_j}} \Big|_{\min}$

Cristallo Monoatomico

Per cristallo Monoatomico si intende dire un cristallo dove tutti gli atomi sono uguali.

Le proprietà di D sono:

$\sum_i D_{ij} = D_{ji}$ ← Invarianza sotto scambio

Fissati gli indici i e j D_{ij} è una Matrice $N \times N$ dove N è la dim. del Cristallo (Grafene $N=2$, N_{3d} $N=3$, ...)

$\sum_{i,j} D_{ij} = D_{ji}$ se $t_i - t_{i'} = t_j - t_{j'}$ ← Invarianza sotto traslazioni

$\sum_j D_{ij} = 0$ ← Se sposti tutti gli atomi in una direzione l'Energia non cambia perché le distanze inter-atomiche non cambiano

Un tipo di approssimazione che si può fare è considerare l'interazione di un atomo solo con gli altri atomi più vicini.

$D_{ij} \neq 0$ se i e j indicano atomi confinanti: t_{ij} di loro

Adesso cerchiamo di ricavare i modi normali detti anche fononi.

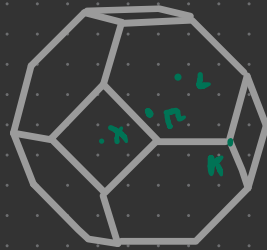
$$m\omega^2 \vec{r}_i = D_{ij} \vec{r}_j \quad \text{suppongo } \vec{r}_i = \vec{A} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_i}$$

$$m\omega^2 \vec{A} = \underbrace{D_{ij} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r}_j - \vec{r}_i)}}_{D(\vec{k})} \vec{A} \quad \text{Così facendo il problema diventa}$$

$$\det [D(\vec{k}) - m\omega^2 I_3] = 0$$

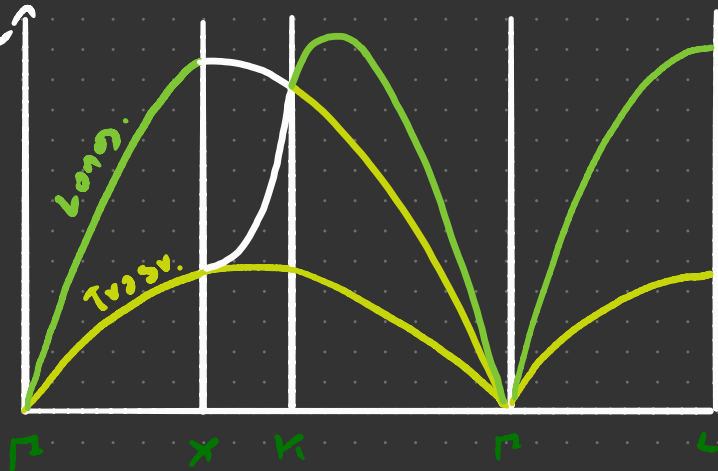
Per ogni \vec{k} ci saranno

3 ω (una per ogni polarizz.)



1) Γ centro
2) centro

Ad esempio
per l'alluminio
i fononi nella
prima zona di
Brillouin sono
così
(FCC)



Cristallo Poliatomico

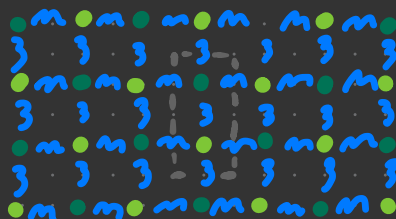
Nel caso in cui il cristallo è poliatomico bisogna aggiungere un indice v che indichi quale atomo della cella fondamentale si vuole considerare.

$$D_{ij}^{v'v} = \frac{\partial^2 E}{\partial r_i^{v'} \partial r_j^{v'}} \Big|_{\min}$$

L'indice v serve a indicare i vari atomi della cella fond.

Le proprietà lungo i e j sono le stesse del cristallo monoatomico.

A questo punto si considerano solo gli atomi limitrofi: così i conti diventano più facili.



A questo punto si suppone che la soluzione abbia la forma

$$r_i^v = A^v e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i^v - i\omega t}$$

Ogni atomo della stessa cella oscilla in fase, ma con ampiezze e direzioni diverse

$$m^v \ddot{r}_i^v = - \sum_{v'} D_{ij}^{vv'} r_j^{v'} \quad m^v \omega^2 A^v = \sum_{v'} \underbrace{D_{ij}^{vv'} e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_i^v - \mathbf{r}_j^{v'})}}_{D^{vv'}(\vec{\mathbf{k}})} A^{v'}$$

$$\det [D^{vv'}(\vec{\mathbf{k}}) - m^v \omega^2 \delta^{vv'} I_d] = 0$$

Questo ci assicura che per ogni valore di $\vec{\mathbf{k}}$ ci sono $3N$ (numero di atomi nella cella) valori di ω

Calori Specifici

Se uno si va a scrivere l'Hamiltoniana espressa nei termini degli operatori di creazione e distruzione dei fononi essa risulta essere

$$H = \sum_{\vec{k}, p} \hbar \omega(\vec{k}, p) \left[a^\dagger(\vec{k}, p) a(\vec{k}, p) + \frac{1}{2} \right]$$

$$E_n(\vec{k}, p) = \hbar \omega(\vec{k}, p) (n + \frac{1}{2})$$

$$U = \sum_{n, \vec{k}, p} e^{-\frac{E_n}{k_B T}} E_n(\vec{k}, p) = \sum_{\vec{k}, p} \frac{\hbar \omega(\vec{k}, p)}{e^{\hbar \omega(\vec{k}, p) / k_B T} - 1} + \sum_{\vec{k}, p} \frac{\hbar \omega(\vec{k}, p)}{2}$$

$$C_V = \frac{\partial U}{\partial T} = \sum_{\vec{k}, p} \hbar \omega(\vec{k}, p) \frac{\partial}{\partial T} \left[e^{\frac{\hbar \omega}{k_B T}} - 1 \right]^{-1} =$$

$$= \frac{1}{k_B} \sum_{\vec{k}, p} \left(\frac{\hbar \omega}{T} \right)^2 \frac{e^{\frac{\hbar \omega}{k_B T}}}{\left[e^{\frac{\hbar \omega}{k_B T}} - 1 \right]^2} = \frac{1}{k_B} \sum_{\vec{k}, p} \left(\frac{\hbar \omega}{T} \right)^2 \cosh^{-2} \left(\frac{\hbar \omega}{2k_B T} \right)$$

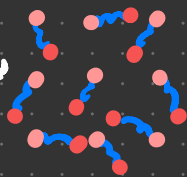
Esistono altri modi più approssimativi per ricavarsi il calore specifico.

Modello di Einstein

Si suppone che gli atomi si trovano in un minimo di potenziale

e poi si approssimano armonicamente

(T grandi)



Modello di Debye

Visto che $\omega = c|\vec{k}|$ dove c è la velocità del suono, si tengono in considerazione solo i modi normali:



Effetti Anarmonici e Squagghiamento

(F2460 - m21c)

Se si considerano gli sviluppi agli ordini successivi di $E_0(\{r_i\})$ si ottengono vari effetti interessanti come

- Scattering a 3 Fononi
- Espansione termica
- Cambio dei modi normali
- Resistività termica
- Squagghiamento (Lo Scioglimento)
- Trasformazione d'acqua in vino
- Etc...

$$\vec{r}_i = \sum_{\vec{k}} \vec{A}(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_i - i\omega(\vec{k})t}$$

$$H = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} + m\omega^2 A^2 = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{\hbar\omega}{\sqrt{2}} \left(\frac{\hbar \vec{k}}{\sqrt{2}m} + \sin \frac{m\omega A}{\hbar} \right) =$$

$$= \sum_{\vec{k}} \frac{\hbar\omega}{N\sqrt{2}} \left(\vec{k}^2 + \frac{A^2}{\ell^2} \right) \quad \ell^2 = \frac{\hbar}{\sqrt{2}m\omega}$$

$$i\ell \vec{k} + \frac{A}{\ell} = \sqrt{N} \sqrt{2} \quad \frac{A}{\ell} = \frac{2 + \epsilon^+}{2^{3/2} \sqrt{N}}$$

$$A = \left[2(\vec{k}) + \epsilon^+(\vec{k}) \right] \sqrt{\frac{\hbar}{2N m \omega}}$$

Quindi

$$\vec{r}_i = \sum_{\vec{R}} [\vec{z}(\vec{R}) + \vec{z}^*(\vec{R})] e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_i - i\omega t} \sqrt{\frac{\hbar}{2N\omega m}}$$

Tutto sto ambradom e' stato fatto per calcolare la distanza quadratica media dal punto di equilibrio, se questa distanza supera una certa soglia, allora il cristallo diventa liquido

$$\vec{r}_i \cdot \vec{r}_i = \sum_{\vec{R}} \frac{\hbar}{2N\omega m} [\vec{z}(\vec{R}) + \vec{z}^*(\vec{R})][\vec{z}^*(\vec{R}) + \vec{z}(\vec{R})] =$$

$$= \sum_{\vec{R}} \frac{\hbar}{N\omega m} \left[\frac{1}{2} + 2\vec{z}^* \cdot \vec{z} + \frac{z^2 + z^{*2}}{2} \right]$$

Questi termini fanno zero quando \vec{z} vai a calcolare la media con la matrice di densità

$$\langle \vec{r}_i \cdot \vec{r}_i \rangle = \sum_{\vec{R}} \frac{\hbar V}{N\omega m} \left[\frac{1}{2} + \langle 2\vec{z}^* \cdot \vec{z} \rangle + \frac{\langle z^2 \rangle + \langle z^{*2} \rangle}{2} \right]$$

$$= \sum_{\vec{R}} \frac{\hbar V}{N\omega m} \left[\frac{1}{2} + e^{-\frac{1}{k_B T}} \right] =$$

ω non va da 0 a ∞ , va da 0 a ω_0 (vedi disegni) (rel. di disp.)

$$= \int \frac{\hbar V}{N\omega m} \left[\frac{1}{2} + e^{-\frac{1}{k_B T}} \right] \frac{k^2 dk}{2\pi^2} = \left(k \propto \frac{\omega}{c} \right)$$

$$= \int_0^{\omega_0} \frac{\hbar \omega V}{N c^3 m} \left[\frac{1}{2} + e^{-\frac{1}{k_B T}} \right] \frac{d\omega}{2\pi^2}$$

Debye

ω_0 e' quella pulsazione che avviene quando la sfera di raggio k ha lo stesso volume della prima zona di Brillouin

$$\frac{4\pi}{3} k_D^3 = \frac{8\pi^3}{\Omega} = \frac{N 8\pi^3}{V} \quad \omega_D^3 = \frac{N 6\pi^2}{V}$$

$$\frac{k_D^2 V}{4\pi^2 N c^3 m} \int_0^{\omega_D} \frac{\hbar \omega}{k_B T} \left[\frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\hbar \omega / k_B T} - 1} \right] \frac{d(\hbar \omega)}{k_B T} =$$

$$= \frac{k_D^2 T^2 V}{2\pi^2 \hbar N c^3 m} \int_0^{x_D} x \left[\frac{1}{2} + \frac{1}{e^x - 1} \right] dx \quad x_D = \frac{\hbar N 6\pi^2}{k_B T V}$$

Nel caso in cui T è grande l'integrale diventa

$$\frac{k_D^2 T^2 V}{2\pi^2 \hbar N c^3 m} \int_0^{x_D} \left(\frac{x}{2} + \frac{x}{1+x-1} \right) dx =$$

$$= \frac{k_D^2 T^2 V}{2\pi^2 \hbar N c^3 m} \frac{\hbar N 6\pi^2}{k_B T V} = 3 \frac{k_B T}{c^3 m}$$

Consideriamo adesso $F = \sqrt{\langle v_x^2 \rangle + \langle v_y^2 \rangle + \langle v_z^2 \rangle}$

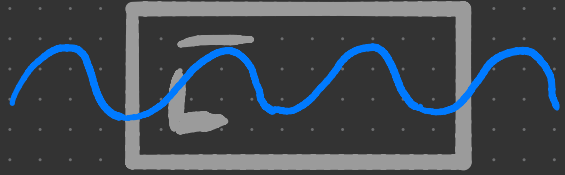
$r_0 \leftarrow$ raggio medio della fondamentale

Se F raggiunge un certo valore F_c che è di solito intorno a 0,2-0,3 (quindi abbastanza indipendente dal solido in esame) avviene lo scioglimento, quindi:

$$\frac{3}{c^3 r_0} \sqrt{\frac{k_B T}{m}} \frac{1}{r_0} = F_c \quad \left| \quad T_s = \frac{F_c^2}{3} \frac{r_0^2}{c^3} \frac{m}{k_B} \right|$$

Polaritroni

Supponiamo di avere un sistema fatto di un'onda elettromagnetica monocromatica e un materiale.

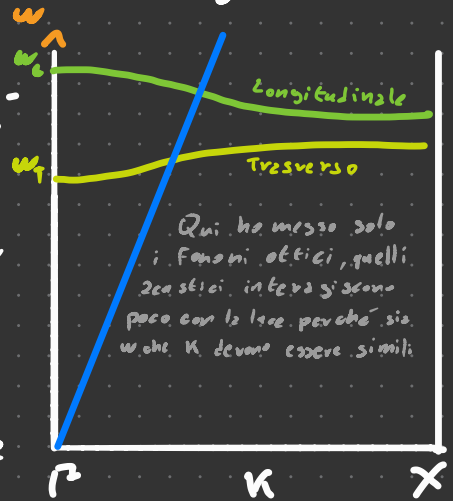


(Il cristallo è bipolare)

Noi siamo interessati di vedere come i fononi interagiscono con l'onda.

Prima vediamo come sarebbe la relazione di dispersione se il cristallo non interagisse con la luce.

In questo caso l'Ham. è separabile e gli auto-stati sono semplicemente il fotone per i $2\epsilon\hbar\omega$ suoi con la sua energia e i fononi pure.



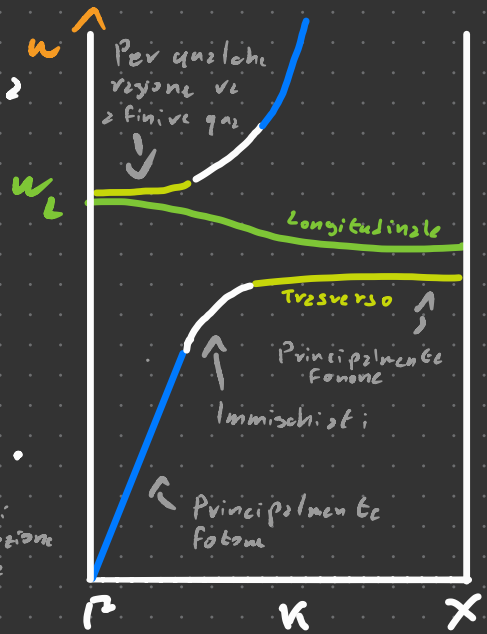
Se accendiamo l'interazione ci aspettiamo che gli auto-stati dell'Ham. siano degli stati misti chiamati **Polaritroni**.

C'è da dire che adesso non si considera l'interazione tra fotoni ed elettroni, quindi tutto questo ragionamento vale per isolanti e semiconduttori e le lunghe onde in analisi sono alte (radio - microonde - infrarosso)

Gli stati si mischiano principalmente quando sia ω che K sono simili.

Le polarizzazioni longitudinali vengono alzate poco perché il campo elettrico ha solo polarizzazione trasversa.

Si potrebbe dire che i polaritroni siano i veri modi normali del sistema perché tengono in considerazione come i veri atomi interazioni tra di loro e lunghe distanze con il tempo ritardato.



Adesso facciamo i conti.

$$\ddot{\vec{r}}_i = -\omega_0^2 \vec{r}_i + \frac{q\vec{E}}{m}$$

Sto supponendo che tutti i fononi di tutte le polarizzazioni oscillino alla stessa frequenza ω_0 per ogni \vec{r}_i (approssimazione).

Se consideriamo che nei fononi ottici gli atomi della cella fond.

si muovono in controfase, e scrivendo tutto in termini dei momenti di dipolo \vec{d}

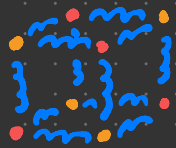
$$\ddot{\vec{d}}_i = -\omega_0^2 \vec{d}_i + \frac{q^2 \vec{E}}{m}$$

A dire il vero questo è un mezzo vuoto.

$$\ddot{\vec{P}}(\vec{r}, t) = -\omega_0^2 \vec{P} + \frac{N}{V} \frac{q^2 \vec{E}(\vec{r}, t)}{m}$$

Prima non l'ho detto, ma qui ho usato un vettore con 2 atomi nella cella fond. e con una struttura cubica (tipo N_2O).

Gli Ioni hanno una carica eff: q



Per qualche ragione che non ci è dato sapere

$$\frac{N q^2}{V m} = \omega_0^2 \frac{\epsilon_s - \epsilon_{\infty}}{4\pi} \quad \text{dove } \epsilon_s \text{ è la costante}$$

dielettrica relativa nel caso in cui il campo è statico, mentre ϵ_{∞} è la costante dielettrica relativa del mezzo a frequenze molto più alte delle frequenze di oscillazione dei fononi, ma comunque molto più basse delle frequenze necessarie per eccitare gli atomi.

Una seconda dimostrazione a dire il vero c'è: consideriamo $\vec{D} = \epsilon_0 \epsilon_s \vec{E}$ nel caso statico

$$\epsilon_s \vec{E} = \vec{E} + 4\pi (\vec{P} + \vec{P}_{el})$$

$$\epsilon_s \vec{E} = 4\pi \vec{P} + (\vec{E} + 4\pi \vec{P}_{el})$$

$$\epsilon_{\infty} \vec{E} = \vec{E} + 4\pi \vec{P}_{el} = \epsilon_e \vec{E}$$

$$\epsilon_{\infty} = \epsilon_e$$

Quindi

$$\epsilon_s \vec{E} = 4\pi \vec{P} + \epsilon_{\infty} \vec{E} \quad \frac{\epsilon_s - \epsilon_{\infty}}{4\pi} \vec{E} = \vec{P}$$

Se invece prendiamo questa equazione di prima sempre nel caso statico

$$\dot{\vec{P}}(\vec{r}, t) = -\omega_0^2 \vec{P} + \frac{N}{V} \frac{q^2}{m} \vec{E}(\vec{r}, t)$$

Questa equazione ha due termini:

Il primo è quello ionico e il secondo quello elettronico.

Gli elettroni si muovono

adiabaticamente anche fino a frequenze molto più alte di quelle dei fononi, quindi la costante dielettrica relativa ϵ_e rimane invariata per tutte le frequenze in esame. Il termine fononico invece sparisce.

$$\ddot{\vec{p}} = 0 \Rightarrow \omega_0^2 \vec{p} = \frac{N q^2}{V} \frac{\vec{E}}{m}$$

Queste due equazioni possiamo metterle a sistema

$$\begin{cases} \omega_0^2 \vec{p} = \frac{N q^2}{V} \frac{\vec{E}}{m} \\ \vec{p} = \frac{\epsilon_S - \epsilon_{00}}{4\pi} \end{cases} \Rightarrow \omega_0^2 \frac{\epsilon_S - \epsilon_{00}}{4\pi} = \frac{N q^2}{V} \frac{1}{m}$$

Questo risultato è valido solo nel caso statico dimostrato così, ma il libro lo usa anche nel caso dinamico senza spiegare perché.

Quindi l'equazione di prima diventa

$$\ddot{\vec{p}}(\vec{r}, t) = \omega_0^2 \left(\frac{\epsilon_S - \epsilon_{00}}{4\pi} \vec{E}(\vec{r}, t) - \vec{p} \right)$$

Unendo queste alle eq. di Maxwell si dovrebbe ottenere la dinamica dei polaritoni.

Tra tutti i modi separatamente i due tipi di polarizzazione

Polaritroni Trasversali

$$\vec{P} = \vec{P}_0 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x} - i\omega t} \quad \vec{E} = \vec{E}_0 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x} - i\omega t} \quad \vec{P}_0, \vec{E}_0 \perp \vec{k}$$

$$D = (\epsilon_0 \vec{E}_0 + 4\pi \vec{P}_0) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x} - i\omega t}$$

Supponiamo che il mezzo non abbia proprietà magnetiche (volendo basterebbe anche che H sia lineare in B , ma lo beh.)

$$\begin{aligned} \nabla \wedge \nabla \wedge \vec{E} &= \nabla(\nabla \cdot \vec{E}) - \nabla^2 \vec{E} = -\nabla \wedge \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial t} \nabla \wedge \vec{B} = \\ &= -\frac{\partial^2}{\partial t^2} \vec{D} = \frac{\omega^2}{c^2} \vec{D} = \frac{\omega^2}{c^2} (\epsilon_0 \vec{E} + 4\pi \vec{P}) \end{aligned}$$

$$\begin{cases} \vec{E}_0 \left(k^2 - \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_0 \right) = -4\pi \vec{P}_0 \\ -\omega^2 \vec{P}_0 = \omega_0^2 \left(\frac{\epsilon_0 - \epsilon_s}{4\pi} \vec{E}_0 - \vec{P}_0 \right) \end{cases}$$

$$\det \begin{vmatrix} k^2 - \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_0 & 4\pi \\ \omega_0^2 \frac{\epsilon_0 - \epsilon_s}{4\pi} & \omega_0^2 - \omega^2 \end{vmatrix} = 0 \quad \text{Faccendo i conti:} \\ \text{si ottiene che}$$

$$\omega^2 = \frac{1}{2\epsilon_0} \left[\omega_0^2 \epsilon_s + c^2 k^2 \pm \sqrt{(\omega_0^2 \epsilon_s + c^2 k^2)^2 - 4\omega_0^2 c^2 k^2 \epsilon_0} \right]$$

Polaretroni longitudinali

$$\vec{P} = \vec{P}_0 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x} - i\omega t} \quad \vec{E} = \vec{E}_0 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x} - i\omega t} \quad \vec{P}_0 \parallel \vec{E}_0 \parallel \vec{k}$$

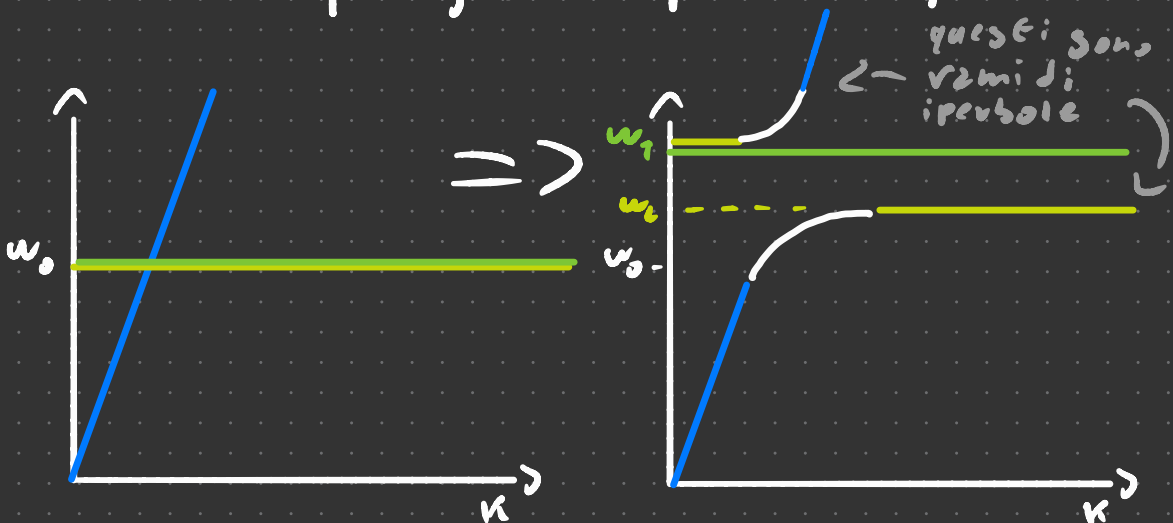
quindi $\vec{D} \parallel \vec{k}$, ma allora $\vec{\nabla} \wedge \vec{D} = \vec{k} \wedge \vec{D} = 0$

$$\text{inoltre } \nabla \cdot \vec{D} = 0 \Rightarrow \vec{k} \cdot (\epsilon_0 \vec{E} + 4\pi \vec{P}) = 0$$

$$\begin{cases} \vec{P}_0 = -\frac{\epsilon_0}{4\pi} \vec{E}_0 \\ -\omega^2 \vec{P}_0 = \omega^2 \left(\frac{\epsilon_0 - \epsilon_\infty}{4\pi} \vec{E}_0 - \vec{P}_0 \right) \end{cases}$$

$$\omega^2 \vec{P}_0 = \omega_0^2 \vec{P}_0 \left(1 + \frac{\epsilon_0 - \epsilon_\infty}{\epsilon_\infty} \right) \rightarrow \omega_0^2 \frac{\epsilon_0}{\epsilon_\infty} \equiv \omega_L^2$$

Facciamo un po' di grafici prima e dopo





PLASMON (I)

I plasmoni così come i polvitroni sono delle quasi-particelle che scaturiscono fuori dall'interazione tra elettroni e il campo elettromagnetico.

Supponiamo che un'elettrone venga spostato dalla sua posizione d'equilibrio \vec{r} di

Spostamento
dall'equilibrio $\rightarrow \vec{u}(\vec{r}, t) = \vec{u}_0 e^{i\vec{k} \cdot \vec{r} - i\omega t}$

Vogliamo sapere com'è il campo elettrico che provoca questo moto.

$$\vec{p} = -\nabla \cdot \vec{P} = ine(\vec{k} \cdot \vec{r}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r} - i\omega t}$$

Agli elettroni ci pensa la polarizzazione, quindi non sono cariche libere

Visto che non ci sono cariche libere $\nabla \cdot \vec{D} = 0 = \nabla \cdot (\vec{E} + 4\pi\vec{P})$

$$\frac{1}{4\pi} \nabla \cdot \vec{E} = -\nabla \cdot \vec{P} = ine(\vec{k} \cdot \vec{r}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r} - i\omega t}$$

Forza di Lorentz

$$\vec{E} = 4\pi ne \vec{u}(\vec{r}, t) \quad m \ddot{\vec{u}}(\vec{r}, t) = -e \vec{E}$$

$$m \ddot{\vec{u}}(\vec{r}, t) = -4\pi ne^2 \vec{u}(\vec{r}, t)$$

$$\text{Quindi } \omega^2 = \frac{4\pi ne^2}{m}$$

Teoria della Conduzione

Dall'equazione di Fermi-Dirac noi sappiamo che la distribuzione delle energie ϵ è qualcosa tipo $\bar{n}_0 = \left[e^{\frac{\epsilon - \mu}{k_B T}} + 1 \right]^{-1}$ all'equilibrio.

Proviamo a vedere che succede se si applica un Campo Elettrico esterno \vec{E} , in questo caso la funzione di distribuzione delle energie inizia a dipendere da \vec{x}, \vec{k}, t .

A un certo punto ritorna \bar{n} all'equilibrio e assume \bar{n} il valore $\bar{n}(\vec{x}, \vec{k}, t)$.

Se per caso uscisci fuori dall'equilibrio ci sarà un termine collisionale I_{coll} che si occuperà di farlo ritornare all'equilibrio, quindi:

$$\bar{n}(\vec{x} + d\vec{x}, \vec{k} + d\vec{k}, t + dt) = \bar{n}(\vec{x}, \vec{k}, t) + I_{\text{coll}} dt$$

Sviluppando in serie di Taylor e sottraendo ad ambo i membri n si ottiene che

$$\frac{\partial \bar{n}}{\partial \vec{x}} \cdot d\vec{x} + \frac{\partial \bar{n}}{\partial \vec{k}} \cdot d\vec{k} + \frac{\partial \bar{n}}{\partial t} dt = I_{\text{coll}} dt$$

$$\left\{ \begin{aligned} d\vec{x} &= \vec{v}(\vec{k}) dt = \frac{\partial E(\vec{k})}{\partial \hbar \vec{k}} dt \\ d\vec{k} &= \frac{d\vec{n}}{dt} dt = -\frac{e}{\hbar} \vec{E} dt \end{aligned} \right.$$

$$I_{\text{coll}} = \frac{\partial \bar{n}}{\partial \vec{x}} \cdot \frac{\partial E(\vec{k})}{\partial \hbar \vec{k}} - \frac{\partial \bar{n}}{\partial \hbar \vec{k}} \cdot e \vec{E} + \frac{\partial \bar{n}}{\partial t}$$

L'espressione "vera" di I_{coll} è del tipo

$$I_{\text{coll}}[\bar{n}(\vec{x}, \vec{k}, t)]:$$

Indica la probabilità per unità di tempo di passare da $n \rightarrow k$

$$= \frac{1}{(2\pi)^3} \int P_{k \leftarrow k'} \bar{n}_{k'} (1 - \bar{n}_k) - P_{k \rightarrow k'} \bar{n}_k (1 - \bar{n}_{k'}) d^3k'$$

Indica quante particelle ci sono in k'

Indica quante particelle mancano in k

Indica l'effetto opposto del primo termine

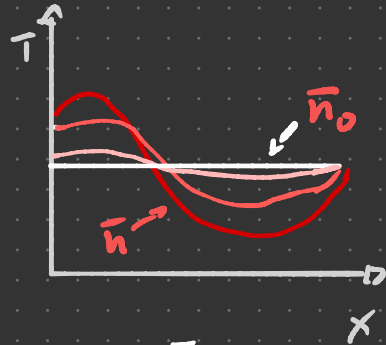
Valutare questo integrale purtroppo non è facile, quindi si semplifica molto se imponiamo che

$$I_{\text{coll}} = \frac{\bar{n}_0 - \bar{n}}{\tau}$$

Questo si è a significare che il sistema tende all'equilibrio esponenzialmente in modo analogo a quello che succede con l'equazione del Calore.

Così facendo però il γ rimane un incognito.

Alla fine l'equazione viene così



$$\frac{\bar{n}_0 \cdot \bar{n}}{\gamma} = \frac{\partial \bar{n}}{\partial x} \cdot \frac{\partial E(\vec{u})}{\partial \hbar \vec{n}} - \frac{\partial \bar{n}}{\partial \hbar \vec{n}} \cdot e^{\vec{E}} + \frac{\partial \bar{n}}{\partial t}$$

Caso con campo elettrico Statico

Supponiamo che \bar{n} sia vicino a \bar{n}_0 , quindi

$$\frac{\partial \bar{n}}{\partial \hbar \vec{n}} \approx \frac{\partial \bar{n}_0}{\partial \hbar \vec{n}} = \frac{\partial \bar{n}_0}{\partial E} \frac{\partial E}{\partial \hbar \vec{n}} = - \frac{e^{\frac{E-u}{\hbar T}}}{\hbar T} \frac{\vec{v}(\vec{n})}{\left[e^{\frac{E-u}{\hbar T}} + 1 \right]^2} =$$

$$= - \frac{\vec{v}(\vec{n})}{\hbar T} \cosh^{-2} \left[\frac{E-u}{2 \hbar T} \right] \text{ per } T \rightarrow 0 \text{ questa equazione diventa}$$

$$\frac{\partial \bar{n}_0}{\partial \hbar \vec{n}} \rightarrow \delta(E-u) \vec{v}(\vec{n}) \text{ Quindi si ha che}$$

$$\frac{\bar{n}_0 - \bar{n}}{\gamma} = - e \delta(E-u) \vec{v} \cdot \vec{E}$$

Un modo formale di attuare l'approssimazione che dice che $\bar{n} \approx \bar{n}_0$ sta nella parte della corrente alternata.

per calcolare la corrente basta ricordarsi che $\bar{n}(\vec{x}, \vec{k}, t) \frac{d^3\vec{x} d^3\vec{k}}{4\pi^3}$ è la probabilità che un elettrone si trovi nel volume dello spazio delle fasi $d^3\vec{x} d^3\vec{k}$.

$$\begin{aligned} \vec{J} &= -e \int \bar{n}(\vec{x}, \vec{k}, t) v(\vec{k}) \frac{d^3\vec{x} d^3\vec{k}}{4\pi^3} = \\ &= - \int \bar{n}_0 v(\vec{k}) - \gamma e \delta(E - \mu) \vec{v} \cdot \vec{E} v(\vec{k}) \frac{d^3\vec{k}}{4\pi^3} \\ &= \gamma e^2 \vec{E} \cdot \int \delta(E - \mu) v \otimes v \frac{d^3\vec{k}}{4\pi^3} \end{aligned}$$

$$\delta[E(\vec{k}) - \mu] d^3k = dS \left| \frac{\partial E}{\partial k} \right|$$

$$\vec{J} = \vec{E} \cdot \gamma e^2 \int_{S_F} \frac{v \otimes v dS}{\left| \frac{\partial E}{\partial k} \right| 4\pi^3}$$

Tensore di
conduttività
 σ_{ij}

Questo integrale non è in generale semplice da calcolare, però se l'elettrone è quasi libero $E \approx \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \rightarrow \left| \frac{\partial E}{\partial k} \right| \approx \frac{\hbar^2 k}{m}$ $dS = k_F^2 d\Omega$

$$\int_{S_F} \frac{v \otimes v dS}{\left| \frac{\partial E}{\partial k} \right| 4\pi^3} = \frac{m^* k_F}{\hbar^2} \frac{1}{4\pi^3} \int_{\Omega} v \otimes v d\Omega$$

$$v \otimes v = \begin{pmatrix} v_x^2 & v_y v_x & v_z v_x \\ v_x v_y & v_y^2 & v_z v_y \\ v_x v_z & v_y v_z & v_z^2 \end{pmatrix}$$

Quando integro in $d\Omega$ i termini fuori diagonale se ne vanno via. I termini nella diagonale invece saranno tutti uguali: $v_x^2 = v_y^2 = v_z^2$ e $v_x^2 + v_y^2 + v_z^2 = |v|^2$

$$\int v \otimes v d\Omega = \frac{|v|^2}{3} \delta_{ij} \quad \int d\Omega = \frac{4\pi}{3} |v|^2 \delta_{ij}$$

$$|v|^2 = \left| \frac{\partial E}{\partial \hbar k} \right|^2 = \frac{\hbar^2 k_F^2}{m^*}$$

$$J = \tau e^2 \frac{\hbar^2 k_F}{m^*} \frac{\vec{E}}{4\pi^3} \frac{4\pi \hbar^2 k_F^2}{3 m^*} =$$

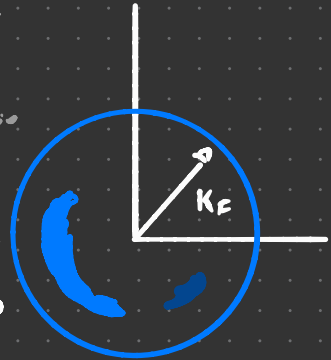
$$= \frac{\tau e^2 k_F^3 \vec{E}}{3 \pi^2 m^*}$$

$$= \frac{\tau e^2 n \vec{E}}{m^*}$$

Noi sappiamo che il numero di occupazione medio di elettroni in un volume $\int_{\vec{k}} d^3k / (2\pi)^3 = \frac{n}{4\pi^3}$

Integrando nello spazio delle fasi e sfruttando il fatto che la Fermi-direzione v_z è gradino si ottiene

$$\frac{4\pi k_F}{3} \cdot \frac{1}{4\pi^3} = n$$



Numero di elettroni per unità di volume

$$J = \frac{\tau e^2 n \vec{E}}{m^*}$$

Corrente Alternata

$$\frac{\bar{n}_0 \cdot \bar{n}}{\gamma} = \frac{\partial \bar{n}}{\partial \vec{x}} \cdot \vec{v} - \frac{\partial \bar{n}}{\partial t \hbar} \cdot e \vec{E}_0 e^{i\vec{k} \cdot \vec{x} - i\omega t} + \frac{\partial \bar{n}}{\partial t}$$

Qui cercheremo di essere più raffinati: tratteremo \bar{n} perturbativamente in modo da poter avere, volendo una precisione arbitrariamente buona, ma poi ci restringeremo al primo ordine

$$\bar{n} = \bar{n}_0 + \bar{n}_1 + \bar{n}_2 + \bar{n}_3 + \dots$$

\bar{n}_0 è lineare in \vec{E}_0 , quindi tratteremo \vec{E}_0 come se fosse al primo ordine

$$\frac{\bar{n}_1 + \bar{n}_2 + \dots}{\gamma} = \frac{\partial \bar{n}_0 + \bar{n}_1 + \bar{n}_2}{\partial \vec{x}} \cdot \vec{v} - \left(\frac{\partial \bar{n}_0 + \bar{n}_1 + \dots}{\partial t \hbar} \right) \cdot e \vec{E}_0 e^{i\vec{k} \cdot \vec{x} - i\omega t} + \frac{\partial \bar{n}_0 + \bar{n}_1 + \dots}{\partial t}$$

A questo punto si eguagliano le equazioni ordine per ordine

$$\left. \begin{aligned}
 & \frac{\partial \bar{h}_0}{\partial \vec{x}} \cdot \vec{v} + \frac{\partial \bar{h}_0}{\partial t} = 0 \\
 - \frac{\bar{h}_1}{\gamma} &= \frac{\partial \bar{h}_1}{\partial \vec{x}} \cdot \vec{v} - \frac{\partial \bar{h}_0}{\partial h \vec{k}} \cdot e^{\vec{k} \cdot \vec{x} - i\omega t} \vec{E}_0 e^{i\vec{k} \cdot \vec{x} - i\omega t} + \frac{\partial \bar{h}_1}{\partial t} \\
 - \frac{\bar{h}_2}{\gamma} &= \frac{\partial \bar{h}_2}{\partial \vec{x}} \cdot \vec{v} - \frac{\partial \bar{h}_1}{\partial h \vec{k}} \cdot e^{\vec{k} \cdot \vec{x} - i\omega t} \vec{E}_0 e^{i\vec{k} \cdot \vec{x} - i\omega t} + \frac{\partial \bar{h}_2}{\partial t} \\
 & \vdots \\
 - \frac{\bar{h}_n}{\gamma} &= \frac{\partial \bar{h}_n}{\partial \vec{x}} \cdot \vec{v} - \frac{\partial \bar{h}_{n-1}}{\partial h \vec{k}} \cdot e^{\vec{k} \cdot \vec{x} - i\omega t} \vec{E}_0 e^{i\vec{k} \cdot \vec{x} - i\omega t} + \frac{\partial \bar{h}_n}{\partial t} \\
 & \vdots
 \end{aligned} \right.$$

Risolviendo una equazione dopo l'altra si ottiene una precisione sempre maggiore

Supponiamo che $\bar{h}_1 = \Phi(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{x} - i\omega t}$

Ignoriamo la prima eq. perché sappiamo già com'è f_0

$$\frac{\Phi}{\gamma} = i \Phi \vec{k} \cdot \vec{v} - \frac{\partial \bar{h}_0}{\partial E} e^{\vec{k} \cdot \vec{x} - i\omega t} \vec{v} \cdot \vec{E}_0 e^{i\vec{k} \cdot \vec{x} - i\omega t} - i\omega \Phi$$

$$\Phi \left(\frac{1}{\gamma} + i\vec{k} \cdot \vec{v} - i\omega \right) = -e^{\vec{k} \cdot \vec{x} - i\omega t} \frac{\partial \bar{h}_0}{\partial E} \vec{v} \cdot \vec{E}_0 e^{i\vec{k} \cdot \vec{x} - i\omega t}$$

$$\vec{h}_i = \frac{-e\gamma \frac{\partial \bar{n}_0}{\partial \epsilon} \vec{v} \cdot \vec{E}_0 e^{i\vec{k}\cdot\vec{r} - i\omega t}}{1 + i\gamma(\vec{k}\cdot\vec{v} - \omega)}$$

$$\vec{J}(t) = -e \int \vec{h}(\vec{x}, \vec{k}, t) \vec{v} \frac{d^3\vec{k}}{4\pi^3}$$

⇨

$$\vec{J}_i(t) = \frac{-e\gamma}{1 + i\gamma(\vec{k}\cdot\vec{v} - \omega)} \int \frac{\partial \bar{n}_0}{\partial \epsilon} (v\theta v) \cdot \vec{E} \frac{d^3\vec{k}}{4\pi^3}$$

Per $\kappa \rightarrow 0$ si può portare \vec{E} fuori dall'integrale

$$\vec{J}_i(t) = \frac{-e\gamma \vec{E}}{1 - i\gamma\omega} \cdot \int \frac{\partial \bar{n}_0}{\partial \epsilon} v\theta v \frac{d^3\vec{k}}{4\pi}$$

Procedendo nei calcoli in modo uguale a come fatto nel caso a corrente continua si vede che il tensore di conducibilità

Tensore di
conducibilità
a corrente continua

$$\sigma_{ij}(\omega) = \frac{\sigma_{ij}(0)}{1 - i\gamma\omega}$$

Teoria del trasporto con gradienti di Temperatura

$$\bar{n}_0(\vec{k}, \vec{x}) = \left[e^{-\frac{E(\vec{k}) - \mu(\vec{x})}{k_B T(\vec{x})}} - 1 \right]^{-1}$$

consideriamo
Corrente
continua

$$I_{\text{coll}} dt = \frac{\partial \bar{n}}{\partial \vec{x}} \cdot \vec{x} + \frac{\partial \bar{n}}{\partial \vec{h}} \cdot d\vec{h} + \frac{\partial \bar{n}}{\partial t} dt$$

$$\frac{\bar{n}_0 - \bar{n}}{\gamma} = \frac{\partial \bar{n}}{\partial \vec{x}} \cdot \vec{v} - e \frac{\partial \bar{n}}{\partial \vec{h}} \cdot \vec{E} + \frac{\partial \bar{n}}{\partial t}$$

$$\bar{n} = \bar{n}_0 + \bar{n}_1 + \dots \approx \bar{n}_0 + \bar{n}_1$$

$$0 = \frac{\partial \bar{n}_0}{\partial t}$$

$\nabla \bar{n}_0$ di \bar{n}_1 perché μ e T cambiano poco con \vec{x} ,
 Questo non è più vero se la corrente è alternata.
 (Perché?)

$$\frac{\bar{n}_1}{\gamma} = \frac{\partial \bar{n}_0}{\partial \vec{x}} \cdot \vec{v} - e \frac{\partial \bar{n}_0}{\partial \vec{h}} \cdot \vec{E}$$

$$\frac{\partial \bar{n}_0}{\partial \vec{h}} = \frac{\partial \bar{n}_0}{\partial E} \frac{\partial E}{\partial \vec{h}} = \frac{\partial \bar{n}_0}{\partial E} \vec{v} = \frac{\vec{v}}{k_B T(\vec{x})} \cosh^2 \left[\frac{E - \mu}{2k_B T} \right]$$

$$\frac{\partial \bar{n}_0}{\partial \vec{x}} = - \cosh^2 \left[\frac{E - \mu}{2k_B T} \right] \left(\frac{\nabla \mu}{k_B T} - \frac{(E - \mu) \nabla T}{k_B T^2} \right)$$

$$= \left(\frac{\nabla \mu}{\partial \vec{x}} - \frac{E - \mu}{T} \frac{\nabla T}{\partial \vec{x}} \right) \frac{\partial \bar{n}_0}{\partial E}$$

$$\frac{\bar{\pi}_1}{T} = \left[\frac{E(\vec{n}) - u(\vec{x})}{T(\vec{x})} \frac{\partial T}{\partial \vec{x}} - \frac{\partial u}{\partial \vec{x}} - e \vec{E} \right] \cdot \vec{v} \frac{\partial \bar{n}_0}{\partial E}$$

A questo punto è possibile calcolarsi un bel po' di cose

$$\begin{aligned} \vec{J}(\vec{x}) &= -e \int \vec{v}(\vec{x}) \bar{n}(\vec{x}, \vec{k}) \frac{d^3 \vec{k}}{4\pi^3} = \\ &= -e \gamma (V \otimes V) \left[\frac{E - u}{T} \frac{\partial T}{\partial \vec{x}} - \frac{\partial u}{\partial \vec{x}} - e \vec{E} \right] \frac{\partial \bar{n}_0}{\partial E} \frac{d^3 \vec{k}}{4\pi^3} \end{aligned}$$

Se dico che $\frac{\partial \bar{n}_0}{\partial E} = \delta \left(\frac{E - u}{k_B T} \right)$ equivale ad affermare

che $T = \Theta K^n$ che non è l'ideale se si vuole vedere come cambiano le cose al variare della temperatura.

Per semplificare la notazione si definisce

$$K_n \equiv -T \int V \otimes V (E - u)^n \frac{\partial \bar{n}_0}{\partial E} \quad \text{che si chiamano coefficienti cinetici}$$

Portando fuori dall'integrale temperature e potenziali chimici senza perdere abbiamo che

$$\vec{J}(\vec{x}) = -e K_1 \frac{\vec{v} T}{T} + e K_0 [\vec{v} \gamma + e \vec{E}]$$

Un'altro tipo di corrente che si può calcolare è la corrente di calore.

Dalla termodinamica si ha che

$$dE = dQ + \mu dN \quad dE(k, x) = E(k, x) dN(k, x)$$

$$dN(k, x) = \bar{n}(k, x) \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \quad \vec{v} dQ = d\vec{J} d^3k \leftarrow$$

$$dQ = (\mu - E) \bar{n} \frac{d^3k}{(2\pi)^3}$$

$$d\vec{J} = (\mu - E) \bar{n} \vec{v} \frac{d^3k}{(2\pi)^3}$$

in teoria dovrebbe essere $\vec{v} \cdot \vec{J} = \frac{dQ}{dt}$, ma si suppone che il calore viene trasportato dagli elettroni in modo elastico, quindi $\vec{v} \cdot \vec{J} = \int \vec{v} \cdot \vec{J} d^3k$

$$\vec{J} = \gamma \int v \otimes v \left[(\mu - E) \left(\frac{\partial \bar{n}}{\partial k} + e \vec{E} \right) - \frac{(\mu - E)^2}{T} \frac{\partial T}{\partial x} \right] \frac{\partial \bar{n}}{\partial E} \frac{d^3k}{(2\pi)^3}$$

Corrente di Calore

Ricorda ti che

$$\vec{J} = \kappa_1 (\vec{v} \mu + e \vec{E}) - \kappa_2 \frac{\vec{v} T}{T}$$

κ_n sono tensori

$$\vec{J} = \kappa_0 (\vec{v} \mu + e \vec{E}) - \kappa_1 \frac{\vec{v} T}{T}$$

Corrente Elettrica

MAGNETISMO

Vogliamo capire che succede se mettiamo un materiale all'interno di un campo magnetico \vec{B}

$$H = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + V(\vec{x})$$

Da ora in poi supporremo che il potenziale sia 2 buche infinitamente alte.

Proviamo prima ad attaccare il caso in cui gli elettroni si muovono in una lastra poggiate sul piano $x-y$ e il campo Magnetico diretto lungo \hat{z}

$$\vec{B} = B \hat{z} \Rightarrow \nabla \wedge \vec{A} = \partial_x A_y - \partial_y A_x = B$$

Scelgo $\vec{A} = -yB\hat{x}$

$$H = \frac{1}{2m} \left(p_x - \frac{e y B}{c} \right)^2 + \frac{p_y^2}{2m} =$$

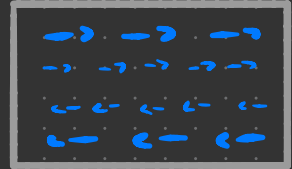
Scelgo una soluzione del tipo

$$\psi(x, y) = e^{i k_x x} \varphi(y)$$

$$H = \frac{1}{2m} \left(\hbar k_x - \frac{e y B}{c} \right)^2 + \frac{p_y^2}{2m} =$$

Da notare come il k_x dipende da y_0

$$= \frac{1}{2m} \left(\frac{e B}{c} \right)^2 \left(y - \frac{c \hbar k_x}{e B} \right)^2 + \frac{p_y^2}{2m} =$$

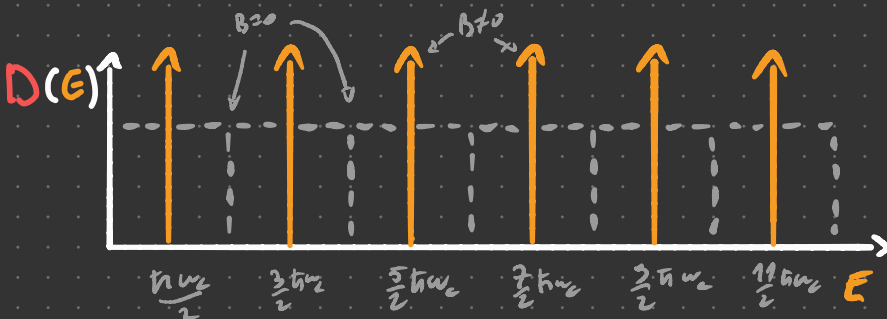


$$= \frac{m \omega_c^2}{2} (y - y_0)^2 + \frac{p_y^2}{2m}$$

Se si vanno a sommare due stati vicini si ottiene un moto che gira e il flusso è il flusso fondamentale $\Phi_0 = \frac{hc}{e^2}$

Questa H_{em} è uguale a quella di un oscillatore armonico con pulsazione ω_c e equilibrio a y_0

$$E_n = \hbar \omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) = \frac{\hbar}{m} \frac{e B}{c} \left(n + \frac{1}{2} \right)$$



Ogni livello energetico ha una degenerazione tale che ci siano tanti elettroni quanti ce ne entrerebbero in un rettangolo braccialeggiato.

Un modo formale di calcolare le degenerazioni dei livelli energetici si ha imponendo che $\gamma_0 < L$ (lunghezza 12str2)

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\hbar k_x}{eB} < L_y \rightarrow k_x = \frac{eB L_y}{\hbar} \\ e^{ik_x L_x} = 1 \rightarrow k_x = 2n\pi / L_x \end{array} \right.$$

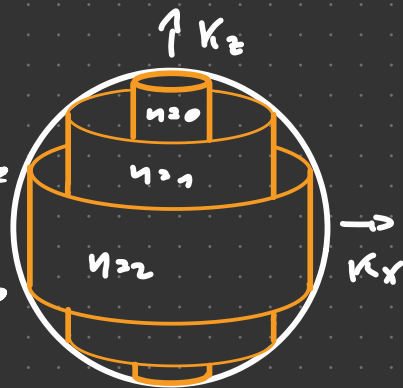
Φ_0 è il flusso fondamentale $\frac{e}{\hbar c}$

$n < \frac{eB S}{c 2\pi \hbar}$ La degenerazione $\frac{eB S}{\hbar c} = \frac{\Phi}{\Phi_0}$ è quindi

Adesso lavoriamo in **3D**

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2m} \left[\left(p_x - \frac{e\gamma B}{c} \right)^2 + p_y^2 + p_z^2 \right] \Rightarrow \\ &\Rightarrow \frac{1}{2m} \left[\left(\hbar k_x - \frac{e\gamma B}{c} \right)^2 + p_y^2 + p_z^2 \right] = \\ &= \frac{1}{2m} \left(\frac{eB}{c} \right)^2 \left(\frac{\hbar k_x c}{eB} - \gamma \right)^2 + \frac{p_y^2 + p_z^2}{2m} = \\ &= m \omega_c^2 (\gamma - \gamma_0)^2 + p_y^2 + p_z^2 \\ E &= \hbar \omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \end{aligned}$$

Questo è equivalente ad essere ristretti nello spazio delle fasi a delle zone cilindriche con l'asse lungo la \hat{z} e la circonferenza di base con raggio



$$r_{\eta} = \sqrt{\hbar \omega_c (n + \frac{1}{2})}$$

Quindi la sfera di Fermi diventa un insieme di cilindri uno dentro l'altro.

La densità di stati non è altro che

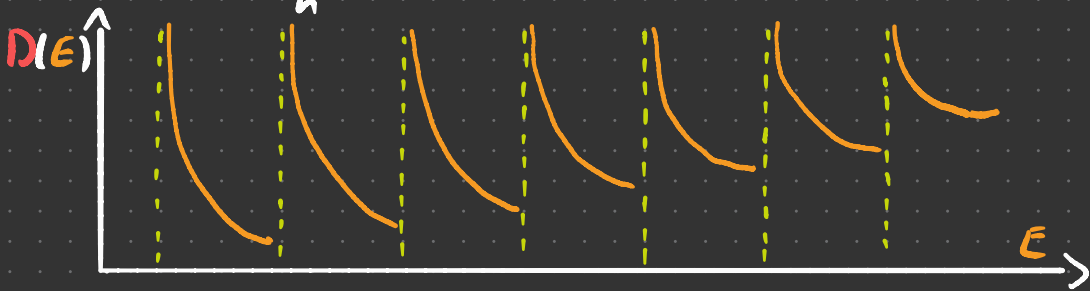
$$D(E) = N_c(B) 2\pi \sum_n \int_{-\infty}^{+\infty} \delta \left[\hbar \omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} - E \right] \frac{2k_z}{2\pi} \frac{dk_z}{2\pi} dz$$

lo spazio delle fasi sta solo lungo z .

$$= \frac{L_z \sqrt{2\pi} N_c(B)}{2\pi \hbar} \sum_n \int \delta \left[\frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} - (E - \hbar \omega_c (n + \frac{1}{2})) \right] \frac{\sqrt{2m}}{\hbar k_z} d \left(\frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \right)$$

$$= L_z \frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \frac{eVB}{ch} \sum_n \int_0^{+\infty} \delta \left[q - (E - \hbar \omega_c (n + \frac{1}{2})) \right] \frac{1}{\sqrt{q}} dq$$

$$= \frac{eVB}{ch^2} \sum_n \frac{\sqrt{m}}{\hbar} \frac{\Theta [E - \hbar \omega_c (n + \frac{1}{2})]}{\sqrt{E - \hbar \omega_c (n + \frac{1}{2})}}$$

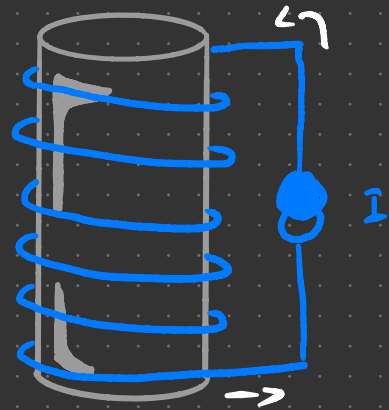


MAGNETO

TERMODINAMICA

Supponiamo di avere un oggetto magnetizzabile all'interno di un solenoide con n giri per unità di lunghezza e lunghezza L .

L'oggetto magnetizzabile può essere anche molto più piccolo (sia in lunghezza che in altezza) del solenoide.



Dall'eq. di Maxwell si ha che $H = \frac{nI}{\mu_0}$ dentro al solenoide.

Vogliamo sapere che succede all'oggetto se noi aumentiamo H e quanto lavoro viene fatto dalla sorgente a entropia costante.

$$dE = \mathcal{E} I dt \quad \mathcal{E} dt = -\frac{d\phi}{dt} nL dt \quad \phi = \int_{\text{spira}} \vec{B} \cdot d\vec{S}$$

$$= \int_{\text{spira}} (\vec{H} - \vec{M}) \cdot d\vec{S} = \underbrace{H S}_{\text{Lavoro fatto sulla spira}} - \underbrace{M S}_{\text{superficie spira}}$$

Lavoro fatto sulla spira, non sull'oggetto

$$dE = I n V dM = \mu_0 V H dM$$

Quindi l'equazione termodinamica dell'energia è

$$dE = TdS - PdV + \mu dN + \chi_0 V H dM$$

Il Grosso dice che $M = -\frac{1}{\chi_0 V} \frac{\partial E_0}{\partial H}$, lo non so come si dimostra.

L'unica mezza dimostrazione che mi passa per la testa è questa. ($T=0, dV=0, dN=0$)

$$dE = \chi_0 V H dM \Rightarrow d(E - \chi_0 V H M) = -\chi_0 V M dH$$

Ma questo è vero solo se $M=0$ allo stato fond. E non è sempre vero.

Inoltre si afferma che $M(T) = -\frac{1}{\chi_0 V} \frac{\partial F}{\partial H}$.

I conti sono gli stessi: a parte il fatto che per mantenere T costante si usa F al posto di E .

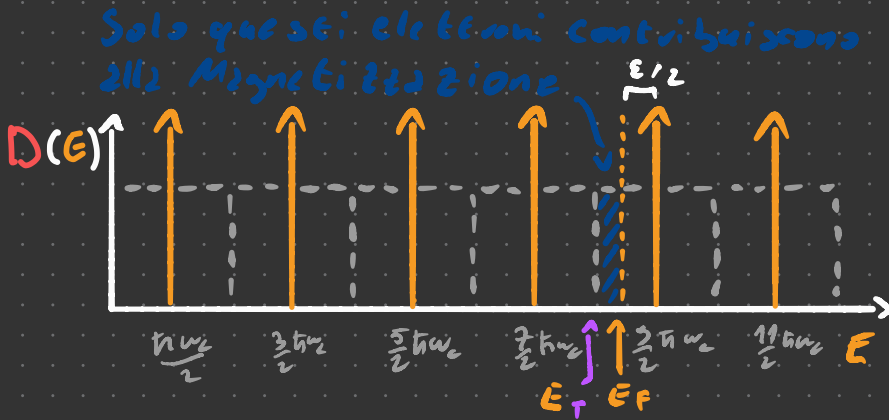
Adesso vediamo come usare queste equazioni cadute dal cielo per vedere come varia la magnetizzazione al variare di B .

Per fare ciò ci interessa vedere come cambia l'Energia dell'oggetto.

Al posto di H usiamo B perché nei calcoli fatti prima avevamo supposto che B era il campo che ci sarebbe stato se l'oggetto magnetizzato non fosse stato lì, quindi è uguale a H .

Consideriamo il gas di elettroni bidimensionale.

Gli unici elettroni che contribuiscono sono quelli in figura



Perché essi vengono spinti verso la delta di Dirac più vicina, quindi la loro energia aumenta o diminuisce a seconda di dove si trova il δ .

$$\begin{aligned}
 \Delta E(B) &= (E_T - E_F) \left(E_T + \frac{\hbar\omega_c}{2} \right) D_0 - (E_T^2 - E_F^2) \frac{D_0}{2} = \\
 &= (E_T - E_F) \left(E_T + \frac{\hbar\omega_c}{2} - \frac{E_T + E_F}{2} \right) D_0 = \\
 &= \frac{1}{2} (\hbar\omega_c - \epsilon) (E_T - E_F + \hbar\omega_c) D_0 = \\
 &= \frac{1}{2} \left[\hbar^2 \omega_c^2 (B) - \epsilon^2 \right] D_0 = \leftarrow \text{Risultato è diverso}
 \end{aligned}$$

Con questa formula bisogna stare attenti perché se si riferisce alla δ più vicina, quindi cambia con discontinuità.

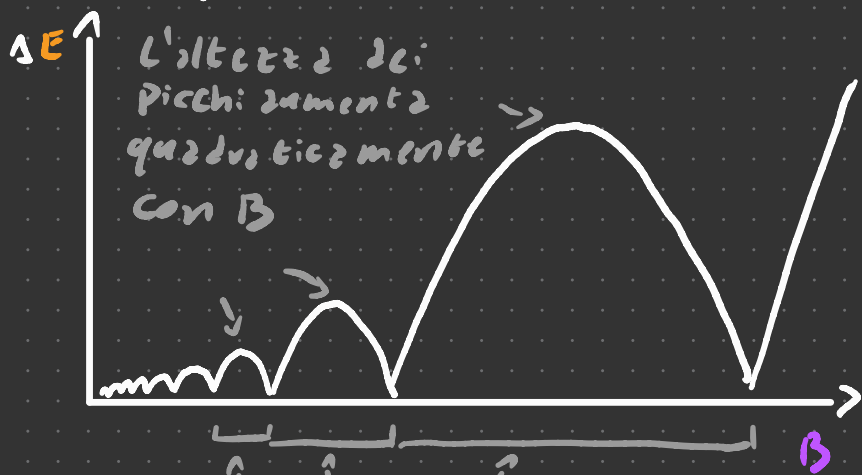
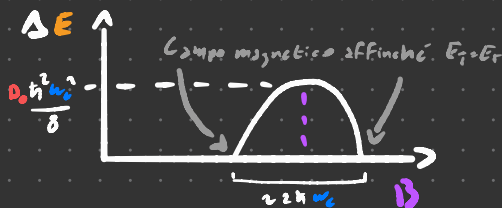
C'è da dire però che quando E cambia e l'Energia di Fermi si trova esattamente su una linea tratteggiata, quindi in quel caso $\Delta E(B) = 0$.

Dunque possiamo concentrarci a vedere come varia $\Delta E(B)$ quando E_F si trova nella "zona d'influenza" della δ di Dirac n -esima. E quando $E_T = E_F = n\hbar\omega_c$ è uguale a

$$\frac{E}{2} = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega_c - E_F = \hbar\omega_c$$

quindi $\Delta E(B)$ è tipo a n fissato, se uno

volesse vedere com'è il comportamento per ogni n all'inizio è così



L2 lunghezza linearmente

EFFETTO HALL

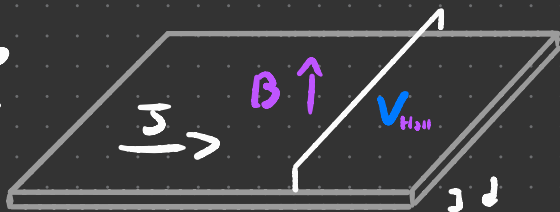
Partiamo dall'effetto Hall classico

Normalmente in un conduttore isotropo

$$\vec{J} = \sigma \vec{E} \text{ con } \sigma \text{ scalare, però se si aggiunge}$$

un campo magnetico

\vec{B} l'isotropia si rompe e σ diventa $\sigma_{ij}(\vec{B})$



$$\vec{J} = \frac{1}{e} \vec{F} = \sigma (\vec{E} + \vec{v} \wedge \vec{B}) = \sigma (\vec{E} + \frac{1}{\rho c} \vec{J} \wedge \hat{z})$$

$$\vec{J} = \sigma \begin{pmatrix} E_x - \frac{B}{\rho c} J_y \\ E_y + \frac{B}{\rho c} J_x \end{pmatrix} = \sigma \begin{pmatrix} J_x + \frac{\sigma B}{\rho c} J_y \\ J_y - \frac{\sigma B}{\rho c} J_x \end{pmatrix} = \sigma \vec{E} \leftarrow \begin{matrix} \text{P-} \\ \text{elettroni} \\ \text{Volume} \end{matrix}$$

matrice di resistività \rightarrow

$$\begin{vmatrix} \frac{1}{\rho} & \frac{B}{\rho c} \\ -\frac{B}{\rho c} & \frac{1}{\rho} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} J_x \\ J_y \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} E_x \\ E_y \end{vmatrix}$$

Intensità di corrente \downarrow

Se $J_y = 0 \rightarrow$

$$\begin{cases} E_y = -\frac{B}{\rho c} J_x \\ E_x = J_x / \rho \end{cases} \quad V_{Hall} = \frac{B}{\rho d} \frac{I}{e}$$

Una proprietà interessante di V_{Hall} è che è indipendente dalla forma e dalla superficie. Di solito viene usata per misurare B .

Posso definire

$$R_{Hall} \equiv \frac{V_{Hall}}{I} = \frac{B}{\rho c d}$$

Si chiama Resistenza di Hall ed è indipendente dalla geometria della superficie.

Adesso passiamo al caso **quantistico**

per far sì che l'effetto sia visibile bisogna essere a temperature molto basse.

Se ragioniamo in tight-binding abbiamo

$$H = \sum_{nm} \tilde{E}_0 |n, m\rangle \langle n, m| + t |n, m+1\rangle \langle n, m| + t |n, m\rangle \langle n, m+1| + t |n+1, m\rangle \langle n, m| + t |n, m\rangle \langle n+1, m|$$

Questo modello di tight binding considera solo lo stato a energia più bassa disponibile, ma visto che siamo a basse temperature va bene

e le energie sono $E(k) = \tilde{E}_0 + 2t \cos(k_2)$

Aggiungere un campo magnetico equivale a mandare $\vec{p} \rightarrow \vec{p} - e\vec{A}/c$ L'Hamiltoniana di sopra però non ha \vec{p} da nessuna parte, però ci sono gli operatori di traslazione $|n, m\rangle \langle n, m+1|$ che sappiamo che sono legati all'operatore di impulso.

Il generatore infinitesimo delle traslazioni è $d\vec{x} \cdot \vec{D}$.

Se ci mettiamo il campo magnetico

$$-i\hbar \vec{D} \rightarrow -i\hbar \vec{D} - \frac{e}{c} \vec{A} \quad \text{quindi} \quad \vec{D} \rightarrow \vec{D} + \frac{ie}{c\hbar} \vec{A}$$

Quindi l'operatore di traslazione trasforma così

$$e^{\int d\vec{x} \cdot \vec{D}} \rightarrow e^{\int d\vec{x} \cdot \vec{D} + \frac{ie}{c\hbar} \int \vec{A} \cdot d\vec{x}}$$



Se mi metto nella gauge di London $A = -\gamma B \hat{x}$

$$|n, m+1\rangle \langle n, m| \rightarrow |n, m+1\rangle \langle n, m| e^{-ian}$$

$$|n+1, m\rangle \langle n, m| \rightarrow |n+1, m\rangle \langle n, m| \quad d = \frac{eB}{c\hbar} z$$

Adesso mettiamo tutto assieme.

$$H = \sum_{nm} \tilde{E}_0 |n, m\rangle \langle n, m| + t e^{-ian} |n, m+1\rangle \langle n, m| + t e^{ian} |n, m\rangle \langle n, m+1| + t |n+1, m\rangle \langle n, m| + t |n, m\rangle \langle n+1, m|$$

Adesso mettiamo lo zero dell'energia in E_0 .

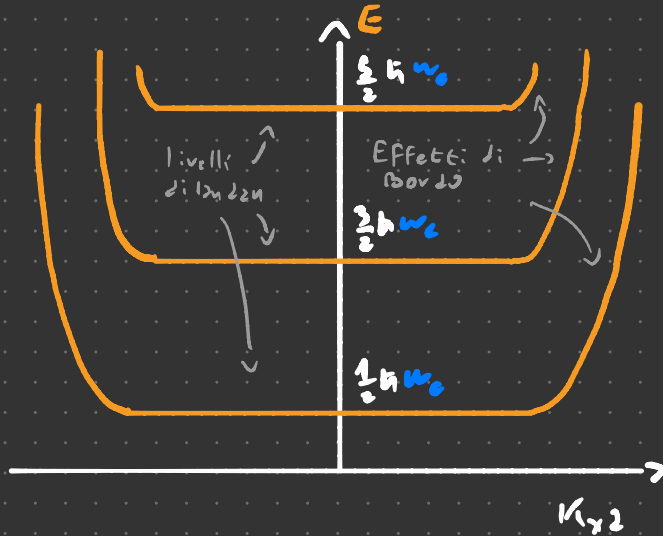
$$|K_y, m\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{N_y}} \sum_n e^{iK_y a n} |n, m\rangle$$

$$\langle K_y, m | H | K_y, m \rangle = 2t \cos(K_y a - n d) \quad \text{ho saltato i conti}$$

$$c_n \equiv 2 \cos(K_y a - n d)$$

$$H = t \begin{vmatrix} c_1 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 1 & c_2 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & c_3 & 1 & \dots \\ 0 & 0 & 1 & \dots & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \dots \end{vmatrix}$$

Diagonalizzandolo \rightarrow




I livelli di Landau rappresentano gli stati degli elettroni all'interno del materiale bidimensionale e sono stati studiati all'inizio del capitolo sul magnetismo.

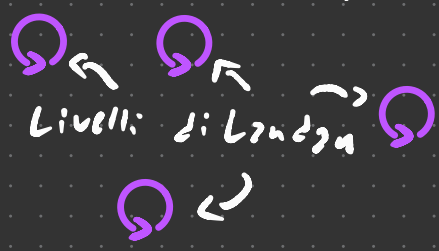
Materiale

I livelli di Landau hanno energia oscillano a una frequenza ω_c

Al bordo gli elettroni si muovono a una frequenza maggiore di ω_c perché non arrivano a finire il giro, quindi hanno una energia maggiore

Effetti di Bordo





Livelli di Landau

Questo spiega come mai gli effetti di bordo hanno una energia maggiore. Per avere una discussione più formale occorre vedere che fanno hanno gli Antostati dell'Ham.

Supponiamo che comunque $\vec{J} = -\frac{c}{2} \vec{F}$ e facendo gli stessi conti dell'effetto Hall classico si riottiene che

$$R_{\text{Hall}} = \frac{B}{\rho_{ed}} = \frac{BS}{cNe} = \frac{I}{cNe}$$

In questo caso però possiamo scrivere N in funzione di B perché sappiamo che ν bande sono occupate e quanti elettroni ci stanno in una banda. Da prima si ha che la degenerazione è $\frac{eBS}{ch}$,

quindi $N = \frac{eBS\nu}{ch} \rightarrow$

$$R_{\text{Hall}} = \frac{h}{\nu e^2}$$

Proprietà ottiche di Semiconduttori e Isolanti

$$H = \frac{1}{2m} \left[\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{x}, t) \right]^2 + V(\vec{r}) =$$
$$= H_0 + \underbrace{\frac{e}{mc} \vec{p} \cdot \vec{A}}_{\text{perturbation}} + \underbrace{\frac{e^2}{2mc^2} A^2}_{\text{piccolo}}$$

$$\vec{A}(\vec{x}, t) = A_0 \hat{e} \cos[i\vec{k} \cdot \vec{x} - i\omega t]$$

$$H = H_0 + \frac{eA_0}{mc} \cos(i\vec{k} \cdot \vec{x} - i\omega t) \vec{p} \cdot \hat{e}$$

La Regola d'oro di Fermi dice che se si ha un Hamiltoniano che abbia questa forma qua

$$H = H_0 + V(\vec{x}) e^{-i\omega t}$$

La probabilità per unità di tempo che una particella dallo stato i a uno j è

$$P_{i \rightarrow j} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle i | V(\vec{x}) | j \rangle|^2 \delta(E_j - E_i - \hbar\omega)$$

Nel nostro caso se $E_j > E_i$
l'equazione risulta



$$P_{i \rightarrow j} = \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{eA_0}{mc} \right)^2 \left| \langle i | e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} \vec{p} \cdot \hat{\epsilon} | j \rangle \right|^2 \delta(E_j - E_i - \hbar\omega)$$

$$P_{j \rightarrow i} = \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{eA_0}{mc} \right)^2 \left| \langle i | e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}} \vec{p} \cdot \hat{\epsilon} | j \rangle \right|^2 \delta(E_j - E_i + \hbar\omega)$$

La prima equazione rappresenta l'assorbimento
di un fotone, l'altra l'emissione stimolata.

Se andiamo a sommare tutte queste probabilità
ci dovrebbe dare il numero totale di eccitazioni
a ω fisso

$$W(\vec{n}, \omega) = \sum_{ij} P_{i \rightarrow j} = |V_{ij}| \equiv \left| \langle i | e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} \vec{p} \cdot \hat{\epsilon} | j \rangle \right|$$

$$= \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{eA_0}{mc} \right)^2 \sum_{ij} |V_{ij}|^2 \left[\bar{n}(E_i) - \bar{n}(E_j) \right] \delta(E_j - E_i - \hbar\omega)$$

↑ ↓
Fermi-Dirac

Se moltiplico W per $\hbar\omega$ mi dà la potenza
assorbita che sarà uguale a $\sigma_2 \sigma_1 + i \sigma_2$

$$\frac{\hbar\omega}{V} W(\vec{n}, \omega) = \vec{E} \cdot \vec{J} = \sigma_1 \frac{|E|^2}{2}$$

Per la dissipazione d'energia
conta solo la parte reale di σ

$$\sigma \nabla \cdot \vec{E} = \nabla \cdot \vec{J} = \frac{\partial \rho_p}{\partial t} = \frac{\partial \nabla \cdot \vec{P}}{\partial t} = -i\omega \chi \nabla \cdot \vec{E}$$

$$\chi = \frac{i\sigma}{\omega}$$

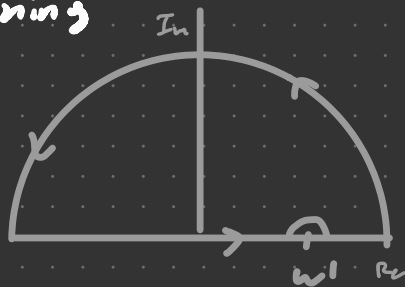
A me tutti sti discorsi non tornano perché
in teoria bisognerebbe essere all'equilibrio
termo dinamico, ma se poi si ve a vedere
senza emissione spontanea non avviene nessun
perdita di potenza.

$$\chi = \chi_1 + i\chi_2$$

$$\chi_2 = \frac{\sigma_1}{\omega} = \frac{2\hbar}{|E|^2} W(\vec{n}, \omega) = \frac{2\hbar}{\omega^2} \frac{e^2}{|A|^2} \bar{V}$$

Visto che $\vec{E} = \chi(\omega) \vec{P}(\omega)$ e la relazione è causale abbiamo che χ deve rispettare le relazioni di Kramers-Kronig

$$\begin{cases} \chi_1(\omega) = \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\chi_2(\omega') d\omega'}{\omega' - \omega} \\ \chi_2(\omega) = -\frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\chi_1(\omega') d\omega'}{\omega' - \omega} \end{cases}$$



Dimostrazione

χ è analitica per $\text{Im}(\chi) > 0$. Quindi quell'integrale è uguale a zero. All'infinito χ scende come $1/\omega^2$ quindi l'integrale lungo la circonferenza larga fa zero.

$$P \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\chi(\omega') d\omega'}{\omega' - \omega} = \pi i \chi(\omega)$$

Andando a vedere separatamente la parte reale e quella immaginaria si ottengono le equazioni qui sopra.

$$\chi_1 = \frac{8e^2}{\sqrt{m^2}} \sum_{ij} |V_{ij}|^2 [\bar{n}(E_i) - \bar{n}(E_j)] P \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\delta(E_j - E_i - \hbar\omega')}{\omega'^2 (\omega' - \omega)}$$

$$= \frac{8e^2}{\sqrt{m^2}} \sum_{ij} \frac{|V_{ij}|^2 [\bar{n}(E_i) - \bar{n}(E_j)] \hbar^3}{(E_i - E_j)^2 (E_i - E_j - \hbar\omega)}$$

$$\chi_2 = \frac{8\pi e^2}{\omega \sqrt{m^2}} \sum_{ij} |V_{ij}|^2 [\bar{n}(E_i) - \bar{n}(E_j)] \delta(E_j - E_i - \hbar\omega)$$

Si può sfruttare la proprietà che

$$\lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{1}{x - i\eta} = \mathcal{P} \frac{1}{x} + i\pi \delta(x)$$

$$\chi = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{8}{V} \left(\frac{e}{m} \frac{\hbar}{E_j - E_i} \right)^2 \sum_{i,j} |V_{ij}|^2 \frac{[\bar{n}(E_i) - \bar{n}(E_j)]}{E_j - E_i - \hbar\omega - i\eta}$$

Adesso concentriamoci solo su χ_2 che i cont. vengono più facili:

A temperature basse la distribuzione \bar{n} diventa a gradino, quindi possiamo scrivere

$$\sum_{i,j} \bar{n}(E_i) - \bar{n}(E_j) \rightarrow \sum_i^{\text{Picini vuoti}} \sum_j$$

$$\chi_2 \rightarrow \frac{8\pi}{V} \left(\frac{e\hbar}{m} \right)^2 \sum_i^{\text{Picini vuoti}} \sum_j |V_{ij}|^2 \delta(E_j - E_i - \hbar\omega)$$

$$V_{ij} = \langle n_i, k_i | e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{x}} \vec{p} \cdot \hat{\mathbf{e}} | n_j, k_j \rangle$$

$$\vec{p} \cdot \hat{\mathbf{e}} | n_j, k_j \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{e}} e^{i\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{x}} u_{n_j}(\vec{x}) =$$

$$= -i\hbar e^{i\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{x}} (\hat{\mathbf{k}}_j \cdot \hat{\mathbf{e}} + \partial_{\mathbf{e}}) u_{n_j}(\mathbf{x})$$

$$V_{ij} = \langle n_i, 0 | e^{i(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_j) \cdot \vec{x}} \vec{p} \cdot \hat{\mathbf{e}} | n_j, 0 \rangle$$

Il prodotto scalare sarà diverso da zero solo se la parte a destra e la parte a sinistra hanno la stessa periodicità, quindi: $\vec{k}_i - \vec{k}_j = \vec{g}$ (lattice reciproco)

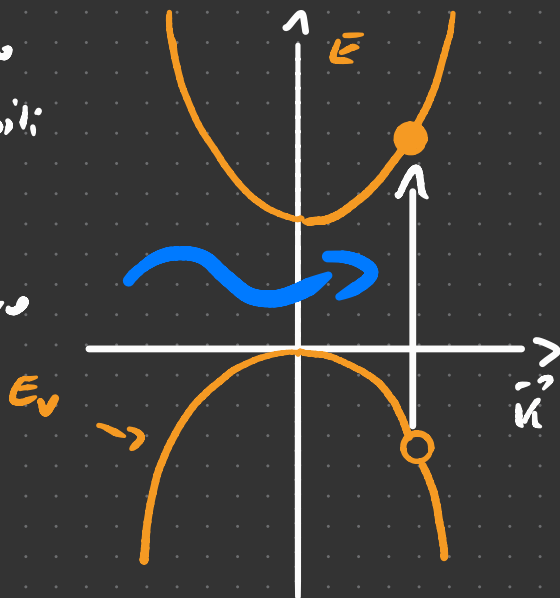
Se lavoriamo con frequenze di luce che vanno fino all'ultravioletto (cio' si ha che $|k_i| \ll k_i$ quindi possiamo imporre $k_i - k_j = 0$

Questo restringe di molto le transizioni effettuabili:

$$\sum_{\text{piccoli } \vec{k}} \sum_{\text{vuoti}} \rightarrow \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{n'=v}^{\infty} \int_{D.z.} d\vec{k}$$

dove v indica in numero dell'ultima zona di valenza

$$V_{i,j} \rightarrow V_{n,n'}(\vec{k})$$

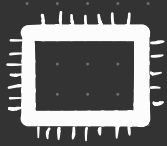


$$\chi_2 = \frac{8\pi}{v} \left(\frac{e\hbar}{m} \right)^2 \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{n'=v}^{\infty} \int_{D.z.} |V_{n,n'}(\vec{k})|^2 \delta [E_{n'}(\vec{k}) - E_n(\vec{k}) - \hbar\omega] d\vec{k}$$

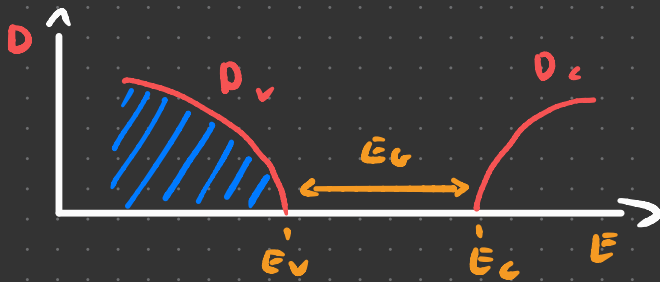
Le due sommatorie di solito finiscono per considerare solo la banda di valenza e la prima di conduzione, inoltre visto che \vec{k} è piccolo il termine $\langle i | e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \vec{p} \cdot \hat{e} | j \rangle \rightarrow \langle i | \vec{p} \cdot \hat{e} | j \rangle$

$$V_{n,n'}(\vec{k}) = \langle n, \vec{k} | \vec{p} \cdot \hat{e} | n', \vec{k} \rangle$$

Semi Conduuttori



Un semiconduttore è un materiale che a $T=0$ non ha nessuna banda semipienezza.



In un semiconduttore senza difetti la densità di stati è più o meno così.

Se si inseriscono delle impurità nel semiconduttore potrebbero crearsi degli stati con un'energia compresa tra E_v ed E_c .

I semiconduttori sono detti **Intrinseci** se non presentano impurità, altrimenti sono detti **Estinseci**.

Possiamo modellizzare la presenza d'impurità come una perturbazione al potenziale periodico

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(r) + \underbrace{V_1(r)}_{\text{Perturbazione dovuta alle impurità (non periodica)}}$$

Scriviamo gli auto stati ψ di questa hamiltoniana

$$\text{così } \psi = \sum_{n,k} A_n(k) |n, k\rangle \rightarrow H|\psi\rangle = E|\psi\rangle \rightarrow$$

$$\rightarrow \sum_{n,k} [E_n(k) - E] A_n(k) |n, k\rangle = \sum_{n,k} V_1(r) A_n(k) |n, k\rangle$$

$$[E_n(k) - E] A_n(k) = \sum_{n', k'} V_{nn'}(k, k') A_{n'}(k')$$

Risolvendo sto problema agli autovalori troviamo come cambiano le energie, ma per vedere più o meno che succede ci tocca fare delle approssimazioni.

Consideriamo solo la banda di conduzione e diciamo che $E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + E_c$. Quindi:

$$\left[\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + E_c - E \right] A_n(k) + \sum_{n'} V(k, k') A_{n'}(k') = 0$$

Dire che $E(k)$ è parabolico implica che gli autovalori dell'Hamiltoniana imperturbata sono esponenziali complesse, quindi: $V(k, k') = \frac{1}{V} \int e^{-i(k-k') \cdot r} V_I(\vec{r}) d\vec{r}$

Se definiamo $F(r) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_k A_n(k) e^{ik \cdot r}$ abbiamo che l'equazione di Schrödinger diventa

$$\left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m^*} + V_I(r) \right] F(r) = (E - E_c) F(r)$$

che è praticamente identica all'equazione di Schrödinger che i fascioni si fanno adesso.

$$V_I \approx -\frac{e^2}{\epsilon r}$$

vicino a una delle impurità quindi crea dei livelli energetici tipo quelli dell'idrogeno



che spingono l'elettrone a un livello energetico

E_I verso la banda di conduzione. Se invece l'impurità ha un'elettrone in meno degli

E_v

atomi che fanno il reticolo cristallino basta fare lo stesso ragionamento in termini delle lacune. Quindi si va a creare un livello energetico vuoto vicino alla banda di valenza.

Aggiungendo impurità siamo in grado di manipolare il potenziale chimico

Per vedere quanto conduce un semiconduttore ci interessa vedere quanti elettroni ha in banda di conduzione, o quante buche ha in banda di valenza. prima Facciamo questo conto per un semicond. senza impurità. Il num. di elettroni in Banda di Cond.

$$N_0(T) = \int_{E_c}^{+\infty} D_c(E) \bar{n}(E) dE = \int_{E_c}^{+\infty} \frac{D_c(E)}{1 + e^{\frac{E - \mu}{kT}}} dE$$

Allo stesso il numero di buche è uguale a

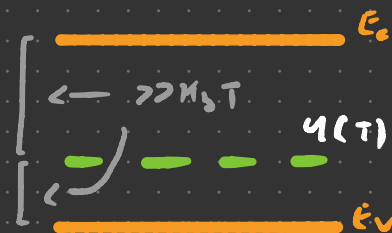
Lo zero al pedice sta a significare che siamo all'equilibrio

$$B_0(T) = \int_{-\infty}^{E_v} \frac{D_v(E)}{1 + e^{\frac{E - \mu}{kT}}} dE$$

Attento al segno dell'esponentiale!

Visto che il numero totale di elettroni è uguale

$N_0(T) = B_0(T)$ consideriamo un range di temperatura tale che quello che sta in figura sia valido. I semiconduttori che



rispettano ciò sono detti: **non-degeneri**, questo ci permette di passare dalla Fermi-Dirac alla Boltzmann

$$N_0(T) \approx \int_{E_c}^{+\infty} D_c(E) e^{-\frac{E-\mu}{k_B T}} dE =$$

$$= e^{-\frac{E_c-\mu}{k_B T}} \underbrace{\int_{E_c}^{+\infty} D_c(E) e^{-\frac{E-E_c}{k_B T}} dE}_{\equiv N_c(T)} = e^{-\frac{E_c-\mu}{k_B T}} N_c(T)$$

Allo stesso modo $N_v(T) = e^{-\frac{E_v-\mu}{k_B T}} N_v(T)$

Il sistema è quindi analogo a quello di un sistema a due livelli con degenerazione N_c e N_v

Adesso vediamo come la presenza di impurità cambi il numero di elettroni nelle varie zone.

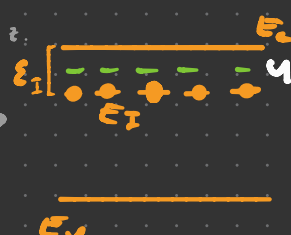
Quando aggiungo un'impurità si va a creare un orbitale localizzato vicino all'atomo, ma visto che l'elettrone è appiccicato con lo spin se provo a metterne 11 vicino (\uparrow e \downarrow) finiscono per respingersi.

Per questo motivo non posso usare la Fermi-Dirac

$$P(E_I) = e^{-\beta E_I} [e^{-\beta E_{I,0}} + e^{-\beta E_{I,1}} + e^{-\beta E_{I,1}}]^{-1} \leftarrow \text{Normaliz.}$$

$$= \frac{1}{e^{-\beta E_I} + 2}$$

Questo è un semiconduttore di tipo n perché gli elettroni che sono negativi, quelli che danno buche si chiamano di tipo p



$$\bar{n}(E_I) = \sum_n \text{Probabilità di trovare } n \text{ elettroni} \times n =$$

$$\uparrow = \text{Probabilità di trovare un elettrone} = P(E_I)$$

Attenzione! \bar{n} indica il numero medio di elettroni con un determinato spin (\uparrow o \downarrow).

Se si vuole avere il numero medio di elettroni prescindere dallo spin allora bisogna moltiplicare per 2

A questo punto dobbiamo imporre la conservazione del numero di elettroni, se indichiamo con N_D il numero di donatori allora si ha che:

$$N_0(T) = \beta_0(T) + N_D [1 - 2\bar{n}(E_I, T)]$$

Numero di elettroni in banda di conduzione

Numero di buche in banda di valenza

Numero di donatori

Degenerazione di Spin (vedi il commento della pagina di prima)

Questa frazione di elettroni non sta attorno alle impurità.

Adesso ci basta derivare esplicitamente N_0, β_0, \bar{n}

$$e^{-\frac{E_c - \mu}{k_B T}} N_0(T) = e^{\frac{E_v - \mu}{k_B T}} N_0(T) + N_D \frac{e^{\frac{E_I - \mu}{k_B T}}}{e^{\frac{E_I - \mu}{k_B T}} + 2}$$

Ricordiamoci che noi vogliamo sapere quanto vale $N_0(T)$ quindi ci tocca calcolarci $x \equiv e^{\beta\mu}$ risolvendo l'equazione di sopra.

Questa è un'equazione di terzo grado rispetto a $x \equiv e^{\beta\mu}$ e nessuno ha la minima voglia di vedere su internet come si risolvono le eq. di III grado, quindi approssimiamo!

Considereremo 3 regioni di Temperature

- 1 $k_B T \ll E_I$ (Regione di ghiacciamento)
- 2 $k_B T \approx E_I$ (Regione di saturazione)
- 3 $E_I \ll k_B T \ll E_c$ (Regione intrinseca)

Cominciamo con la regione di ghiacciamento.

In questo caso il potenziale chimico è compreso tra E_v e E_c (vedi immagine della pagina prima).

$\beta_0(T) \approx 0$ perché $e^{\frac{E_v - \mu}{k_B T}} \rightarrow 0$

$$2\bar{n} \rightarrow \frac{1}{2} e^{\frac{E_I - \mu}{k_B T}}$$

Mettendo tutto insieme esce fuori questo

$$e^{-\frac{E_c - \eta}{k_B T}} N_c(T) = \frac{N_d}{2} e^{\frac{E_i - \eta}{k_B T}} \quad e^{\frac{2\eta}{k_B T}} N_c(\bar{T}) = \frac{N_d}{2} e^{\frac{E_i + E_c}{k_B T}}$$

$$e^{\beta \eta} = \sqrt{\frac{N_d}{2 N_c}} e^{\frac{E_i + E_c}{2 k_B T}} \quad \text{rimettendo } e^{\beta \eta} \text{ nell'espressione di } N_0 \text{ esce fuori questo}$$

$$N_0(T_{\text{piccolo}}) = \sqrt{\frac{N_d N_c(T)}{2}} e^{\frac{E_i - E_c}{2 k_B T}}$$

Adesso passiamo alla regione di saturazione ($E_i \approx k_B T$) in questo caso non conviene fare conti, ma basta notare che a queste temperature la probabilità di trovarsi nella banda di conduzione o in un'impurità è dello stesso ordine di grandezza, ma il numero di stati in banda di conduzione è enormemente più grande, quindi tutti gli elettroni si vanno a mettere là:

$$N_0(T_{\text{saturazione}}) \approx N_d$$

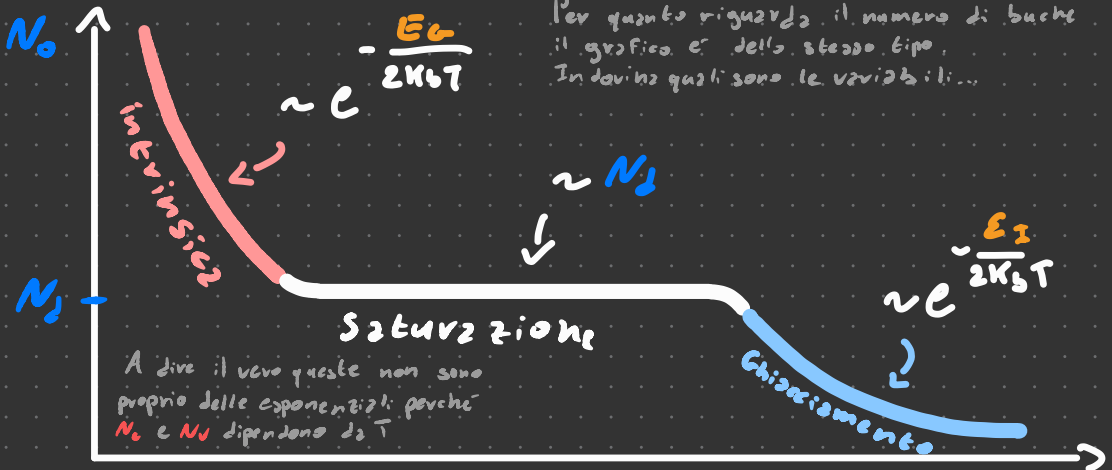
Per quanto riguarda la regione intrinseca ($E_i \ll k_B T \ll E_c$) abbiamo che gli elettroni riescono a saltare tra le due bande. Visto che gli orbitali del drogante sono pochi rispetto al numero di orbitali liberi dove gli elettroni possono andare a infilarsi possiamo dire che $N_d \ll N_0, N_c$. Quindi:

$$e^{-\frac{E_c - \eta}{k_B T}} N_c(T) = e^{-\frac{E_v - \eta}{k_B T}} N_v(T)$$

$$e^{-\eta} = \sqrt{\frac{N_c}{N_v}} e^{-\frac{E_v + E_c}{2k_B T}}$$

Quindi alla fine $N_i(T) = e^{-\frac{E_c}{2k_B T}} \sqrt{N_c(T) N_v(T)}$

A questo punto disegniamo il grafico



Da qualche parte qui ci sta $1/E_c$

Da qualche parte qui ci sta $1/E_1$

Attento che qui ci sta $1/k_B T$ non T

Nel caso in cui non ci siano impurità resta solo la zona intrinseca ed e' per questo che si chiama così

Trasporto nei Semiconduttori

Per qualche strana ragione ci tocca usare la versione scema della legge del trasporto di Boltzmann.

Il ragionamento è che in assenza di forze esterne la corrente è proporzionale al gradiente di densità di portatori di carica

$$\vec{J}_e = e D_e \vec{\nabla} N(x) \quad \vec{J}_h = -e D_h \vec{\nabla} B(x)$$

Corrente dovuta agli elettroni in banda di conduzione

Costante di proporzionalità

Gradiente della concentrazione di elettroni in banda di conduzione

Stessa cosa, ma per le buche

Se ci mettiamo un campo elettrico allora

$$\vec{J}_e = \frac{N e^2 \tau_e}{m_e^*} \vec{E} + e D_e \vec{\nabla} N \approx N e \mu_e \vec{E} + e D_e \vec{\nabla} N$$

Per ora facciamo finta di avere a che fare con un semiconduttore non degenere. (Vai a vedere qualche pagina indietro)

Un semiconduttore di dimensioni finite all'equilib. sottoposto a un campo elettrico esterno ha $\vec{J} = 0$

$$N(\vec{x}, T) = e^{-\frac{E_c(\vec{x}) - \mu}{k_B T}} N_c(T) \quad E_c(\vec{x}) = E_c(0) + e x |E|$$

Vero solo se $J=0$

$$\vec{\nabla} N = - \frac{\vec{\nabla} E_c(\vec{x})}{k_B T} e^{-\frac{E_c(\vec{x}) - \mu}{k_B T}} N_c(T) = - \frac{\vec{E}}{k_B T} e N_c(\vec{x}, T)$$

Visto che $\vec{J} = 0$ $N_c \mu_c \vec{E} + e D_c \vec{\nabla} N = 0$

$$N_c \mu_c \vec{E} = - \frac{D_c \vec{\nabla} N}{k_B T} \rightarrow D_c = \frac{k_B T \mu_c}{e}$$

Questa relazione è valida sempre, noi ce la siamo ricavata all'equilibrio perché è più facile, allo stesso modo $D_0 = q_0 k_B T$.

Che succede se ci sono dei processi che fanno spuntare o sparire elettroni e buche?

indichiamo con $G_e(v, t)$ il numero di elettroni generati per unità di volume e per unità di tempo

invece con $R_e(v, t)$ in numero di elettroni rimossi

L'equazione di continuità ci dice che

$$\frac{\partial N}{\partial t} = \nabla \cdot \frac{\vec{J}_e}{e} + G_e - R_e \quad \frac{\partial B}{\partial t} = - \nabla \cdot \frac{\vec{J}_B}{e} + G_B - R_B$$

se definisco $\vec{J} = \vec{J}_e + \vec{J}_B$

$$\frac{\partial (N - B)}{\partial t} = \frac{1}{e} \nabla \cdot \vec{J} + G_e - G_B - R_e + R_B$$

Se non ci sono sorgenti esterne di elettroni:

$$G_e = G_B \text{ e } R_e = R_B \rightarrow \frac{\partial (N - B)}{\partial t} = \frac{1}{e} \nabla \cdot \vec{J}$$

Adesso cerchiamo di capire quanto valgono G_e, G_B, R_e, R_B . Come detto prima $G_e = G_B \equiv G$ e $R_e = R_B \equiv R$. Possiamo supporre che

$$R - G \begin{cases} \propto N \text{ fissato dipende linearmente in } B \\ \propto B \text{ fissato dipende linearmente in } N \end{cases}$$

Riduzione per unit  di volume e di tempo del numero di elettroni liberi e buche e inoltre all'equilibrio termico $G = R \approx 2 \text{ zero}$

$$R - G = c_1 N B + c_2 N + c_3 B - c_1 N_0 B_0 - c_2 N_0 - c_3 B_0$$

L'equazione dev'essere simmetrica se mandiamo $N \rightarrow B$ e $N_0 \rightarrow B_0$. Quindi esce un'equazione cos 

$$R - G = A(NB - N_0 B_0) + C(N + B - N_0 - B_0)$$

Nel libro il termine con la C non c'  (Perch ?)

$$R - G = A(NB - N_0 B_0) \leftarrow \text{Ricordati che } R, G, N, \text{ e } B \text{ dipendono da } \mu \text{ e } E$$

Trasporto in Semiconduttori Dopati:

Prendiamo un semiconduttore di tipo n . Se siamo fuori dalla regione intrinseca allora $N_0 \gg B_0$, supponiamo anche che $\Delta N, \Delta B \ll N_0 \rightarrow N \approx N_0$.

$$R_e - G_e = A N_0 \Delta B$$



STEFANO RODDARO

Registri a.a. 2019/2020

DATI REGISTRO

insegnamento	FISICA DELLO STATO SOLIDO (cod. 204BB)
corso di studi	WFI-LM - FISICA <i>Condiviso con altri corsi di laurea dettaglio</i>
periodo	Primo semestre
responsabile	STEFANO RODDARO
docenti	STEFANO RODDARO , ALESSANDRO PITANTI
totale ore	55 (Lezione: 53 ore , Esercitazione: 2 ore)

[Calendario lezioni](#) [Dettaglio ore](#)

LEZIONI

1.  [Lun 23/09/2019 16:00-18:00 \(2:0 h\)](#) lezione: Course description and organization. Periodic unidimensional systems. Bloch theorem and representation of the eigenvalues in the reciprocal space. Kronig-Penney model. (STEFANO RODDARO)
2.  [Mar 24/09/2019 10:00-12:00 \(2:0 h\)](#) lezione: Transfer matrix method. Properties of the transfer matrix and expression in terms of the amplitudes r and t . Double barrier problem and resonant tunneling. Limit of infinite barrier sequence and link to the Kronig Penney model. Resonance conditions for N identical barriers. (STEFANO RODDARO)
3.  [Gio 26/09/2019 10:00-11:00 \(1:0 h\)](#) lezione: Simplified tight binding model in 1D: link between the hopping parameter and band width. Nearly free-electron model in 1D. (STEFANO RODDARO)
4.  [Lun 30/09/2019 16:00-18:00 \(2:0 h\)](#) lezione: Group velocity. Acceleration theorem (classic and quantum versions). Constant electric field: single band approximation and its validity; Bloch oscillator. (STEFANO RODDARO)
5.  [Mar 01/10/2019 10:00-12:00 \(2:0 h\)](#) lezione: Geometry of crystals. Bravais lattice, primitive vectors and cells. Restriction theorem. Plane groups. Space groups. Simple and compound crystals. Common crystal examples. (STEFANO RODDARO)
6.  [Gio 03/10/2019 10:00-11:00 \(1:0 h\)](#) lezione: Reciprocal lattice. First Brillouin zone: definition and common examples. Particle scattering on a crystal, introduction. (STEFANO RODDARO)
7.  [Lun 07/10/2019 16:00-18:00 \(2:0 h\)](#) lezione: X-ray diffraction. Bragg condition, von Laue condition and their equivalence. Effect of the BL and of the base on the diffraction pattern. General introduction to the hierarchy of the 32 point symmetry groups in 3D. (STEFANO RODDARO)
8.  [Mar 08/10/2019 10:00-12:00 \(2:0 h\)](#) lezione: Definition of n th Brillouin zone and folding of a free-electron parabola in 2D and 3D. Degeneracy and filling of the electronic bands, definition of Fermi surface. Density of states and critical points in 1D, 2D and 3D. (STEFANO RODDARO)
9.  [Gio 10/10/2019 10:00-11:00 \(1:0 h\)](#) lezione: Exercises: degeneracies in the folded free-electron dispersion (2D and 3D case); band structure of Al; diffraction from a diamond structure. (STEFANO RODDARO)
10.  [Lun 14/10/2019 16:00-18:00 \(2:0 h\)](#) lezione: Exercise on Zener tunneling using the Landau-Zener formula for non-adiabatic transitions. Single-orbital tight binding on a square/cubic lattice: "squarium" and "cubium", critical points, density of states and open Fermi surfaces. (STEFANO RODDARO)
11.  [Mar 15/10/2019 10:00-11:00 \(1:0 h\)](#) lezione: The " $k \cdot p$ " theory and the calculation of the effective mass tensor. Energy gaps and band mass in III-V semiconductors. (STEFANO RODDARO)
12.  [Mar 15/10/2019 11:00-12:00 \(1:0 h\)](#) lezione: Frozen lattice approximation. From the many-electron problem to the one-electron hamiltonian: Hartree approximation. (STEFANO RODDARO)
13.  [Lun 21/10/2019 16:00-18:00 \(2:0 h\)](#) lezione: Hartree-Fock approximation. Basic ideas behind DFT. Intro to band calculation methods. Tight binding formalism and semi-empirical TB. (STEFANO RODDARO)
14.  [Mar 22/10/2019 10:00-12:00 \(2:0 h\)](#) lezione: Tight binding examples: nearest neighbour expansions on a simple FCC, s-band and p-bands; graphene. (STEFANO RODDARO)
15.  [Gio 24/10/2019 10:00-11:00 \(1:0 h\)](#) lezione: Herring catastrophe. Orthogonalized plane waves.

- Pseudopotentials. (STEFANO RODDARO)
- ✓ 16. [Mar 29/10/2019 10:00-12:00 \(2:0 h\)](#) lezione: Empirical pseudopotentials for diamond and zincblend structures. Norm-conserving pseudopotentials. Intro to conduction, Drude model . (STEFANO RODDARO)
 - ✓ 17. [Gio 31/10/2019 10:00-11:00 \(1:0 h\)](#) lezione: Orders of magnitude for metals parameters in Drude theory. Sommerfeld model and Sommerfel expansion. (STEFANO RODDARO)
 - ✓ 18. [Lun 04/11/2019 16:00-18:00 \(2:0 h\)](#) lezione: Sommerfeld expansion: dm/dT , c_V . Boltzmann transport equation in the relaxation time approximation, charge transport. (STEFANO RODDARO)
 - ✓ 19. [Mar 05/11/2019 10:00-12:00 \(2:0 h\)](#) lezione: Heat current density and demonstration of WF law. Seebeck coefficient. Limits for the Sommerfeld model. Thermoionic emission and Richardson law. (STEFANO RODDARO)
 - ✓ 20. [Gio 07/11/2019 10:00-11:00 \(1:0 h\)](#) lezione: Magnetic effects in the semiclassical limit, Bohr-Leeuwen theorem (only mentioned). Magnetization and free energy. Landau levels. (STEFANO RODDARO)
 - ✓ 21. [Lun 11/11/2019 16:00-18:00 \(2:0 h\)](#) lezione: Landau levels and magnetization effects. Landau tubes and magnetization effects in the Sommerfeld model. De Haas Van Alphen effect. (STEFANO RODDARO)
 - ✓ 22. [Mar 12/11/2019 10:00-12:00 \(2:0 h\)](#) lezione: Integer quantum Hall effect. Landau level quantization with edge modes. Calculation of the current. Effect of disorder. (STEFANO RODDARO)
 - ? 23. [Gio 14/11/2019 10:00-11:00 \(1:0 h\)](#) lezione: More details on magnetization oscillations, formalization of the integral of orbital magnetization for a free electron system. (STEFANO RODDARO)
 - ✓ 24. [Mar 19/11/2019 10:00-12:00 \(2:0 h\)](#) lezione: Born Huang approximation and Born Oppenheimer approximation. (STEFANO RODDARO)
 - ✓ 25. [Gio 21/11/2019 09:00-11:00 \(2:0 h\)](#) lezione: Linear monoatomic and diatomic crystal: derivation of acoustic and optical phonon dispersions. Strong coupling and coupling of lattice vibrations with light: phonon-polaritons. (ALESSANDRO PITANTI)
 - ✓ 26. [Lun 25/11/2019 16:00-18:00 \(2:0 h\)](#) lezione: Lorentz model for dielectric function. Quantum theory of the harmonic crystal and derivation of specific heat (Einstein and Debye). Anharmonic effects: corrections to specific heat, Lindemann criterion, thermal conductivity and umklapp processes. (ALESSANDRO PITANTI)
 - ✓ 27. [Mar 26/11/2019 10:00-12:00 \(2:0 h\)](#) lezione: Optical transitions, transverse and longitudinal dielectric constants. Direct optical transitions (dipole approximation). Kramers-Kronig relationship. Plasma Frequency. Examples of absorption spectra. Purcell effect for spontaneous emission. (ALESSANDRO PITANTI)
 - ✗ 28. [Gio 28/11/2019 09:00-11:00 \(2:0 h\)](#) lezione: Indirect optical transitions. Various examples of absorption spectra and different trends. Drude model for dielectric function and optical properties of metals. Surface Plasmon Polaritons. (ALESSANDRO PITANTI)
 - ✓ 29. [Lun 02/12/2019 16:00-18:00 \(2:0 h\)](#) lezione: Introduction to semiconductors and to band dispersions close to the gap for commons cubic semiconductors. Carrier statistics in intrinsic semiconductors. (STEFANO RODDARO)
 - ✓ 30. [Mar 03/12/2019 10:00-12:00 \(2:0 h\)](#) lezione: Shallow impurities and deep center. Envelope function approximation. Statistics of electron occupancy in impurities. Carrier density in doped semiconductors. (STEFANO RODDARO)
 - ✓ 31. [Gio 05/12/2019 09:00-11:00 \(2:0 h\)](#) lezione: Drift-diffusion equations. Generation-recombination phenomena, model for radiative GR and for trap-mediated GR. Diffusion length. (STEFANO RODDARO)
 - ? 32. [Lun 09/12/2019 16:00-18:00 \(2:0 h\)](#) esercitazione: Final details about magnetism and very brief introduction to excitonic effects in semiconductors. ** END OF THE COURSE ** (STEFANO RODDARO)