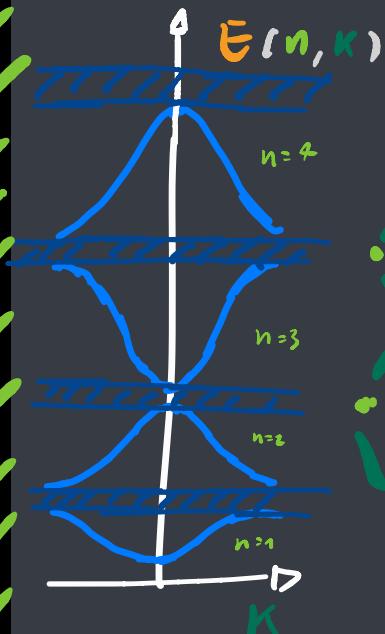


# Fisica dello Stato Solido



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

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

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

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

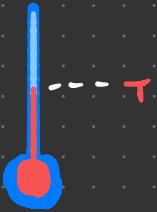
Università di Pisa

A.A 2019-2020

Francesco Sacco

Francesco215@live.it

# Distribuzioni Termodinamiche



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

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 centrale in  $\bar{n}$

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

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

# Come Funzionano i Solidi

Se vogliamo scrivere l'Hamiltonianz completz di un solido esser visi taz

energie cinetiche di  
Elettroni e Atomi

Potenziale repulsivo  
degli elettroni

$$\hat{H} = \left[ \sum_{e_i} \frac{p^2}{2m_e} + \sum_{A_i} \frac{p^2}{2m_A} \right] + \left[ \sum_{e_i, e_j} \frac{e^2}{|\vec{r}_{e_i} - \vec{r}_{e_j}|} \right] +$$

$$+ \sum_{A_i, A_j} \frac{Z_{A_i} Z_{A_j} e^2}{|\vec{r}_{A_i} - \vec{r}_{A_j}|} - \sum_{e_i, A_j} \frac{Z_{A_j} e^2}{|\vec{r}_{e_i} - \vec{r}_{A_j}|}$$

Potenziale repulsivo  
degli Atomi

Potenziale attrattivo  
tra elettroni e Atomi

Questez Hamiltonianz non e' risolvibile  
Analiticamente, quindi si fanno  
delle approssimazioni

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

I ragionamenti che sta dietro è questo: gli elettroni sono  $\approx 1000$  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 calcolare lo stato fondamentale degli elettroni considerando gli atomi fermi.

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

Una volta calcolato lo stato fond. 107 si calcola  $E_0 = \langle 0 | H_e | 0 \rangle e^{i\hbar\omega}$ . Degli atomi diventa

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

Concentriamoci sull'Hamiltoniana degli elettroni:

$$\equiv h_i$$

$$H_e = \sum_{e_i} \frac{p_i^2}{2m_e} - \sum_{e_i, A_s} \frac{z_{A_s} e^2}{|\vec{r}_{e_i} - \vec{r}_{A_s}|} + \sum_{e_i \neq e_j} \frac{e^2}{|\vec{r}_{e_i} - \vec{r}_{e_j}|}$$

$$\equiv V_{\text{nuc}}(\vec{r}_i) \quad \equiv \sum_{j \neq i} \frac{e^2}{r_{ij}}$$

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

Là funzione d'onda di tutti gli elettroni:

$$|\Psi\rangle = |\psi_1\rangle |\psi_2\rangle \dots |\psi_N\rangle, \text{ in teoria VS antisimmetrica, ma facciamo prima a sceglierne una che lo è già, cioè}$$

$$|\psi_1\rangle |\psi_2\rangle \dots |\psi_n\rangle = \sum_{i_1, i_2, \dots, i_n} \epsilon_{i_1, i_2, \dots, i_n} |\psi_{i_1}\rangle |\psi_{i_2}\rangle \dots |\psi_{i_n}\rangle$$

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 riguarda  
su due elettroni diversi.

Nel caso di primi se l'Ham. non era  
antisimmetrica non cambierebbe niente, ora  
sì,

$$\langle \Psi | \frac{e^2}{r_{ij}} | \Psi \rangle = \text{(controlla pollo si)}$$

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

dove ora in poi indicherò con  $|i\rangle \equiv |\Psi_i\rangle$  e  
 $|i\rangle \equiv |\Psi_i\rangle | \Psi_j \rangle$

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

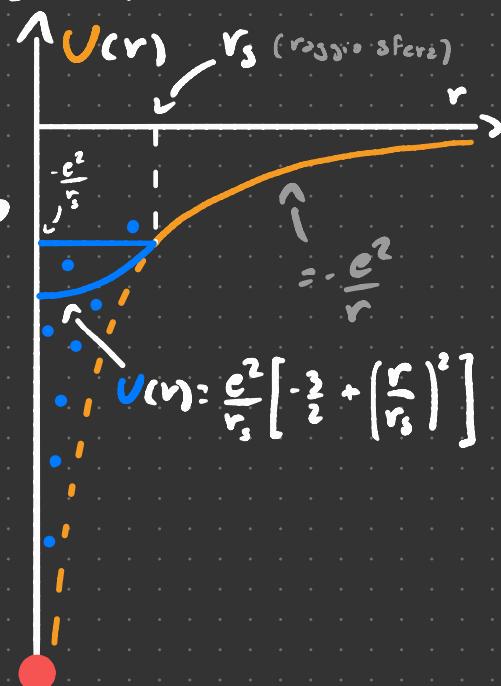
$$= \sum_i \langle i | h_i | i \rangle + \sum_{j>i} \left[ \langle ij | \frac{e^2}{r_{ij}} | ij \rangle - \langle is | \frac{e^2}{r_{is}} | is \rangle \right]$$

$= G(\{i\})$  ← Questo è un funzionale, quindi  
possiamo 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 casinò delle pagine prime.

Alla stato fondamentale gli elettroni si vengono a mettere intorno agli atomi del reticolo e finiscono per schermarselo. Questo va a creare un potenziale effettivo. La scelta del potenziale giusto è più un'arte che una scienza, quindi si finisce a 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

$$D(E) = 2V \int \delta(E(\vec{R}) - E) d\vec{R} \frac{d^3R}{(2\pi)^3}$$

Sarebbe ottimo sbizzarrirsi dell' $\delta$

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

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

$$= \sum_{\text{Zeri}} \frac{1}{|\vec{\nabla} F(\vec{s})|} = \sum_{F=0} \frac{d\vec{x}}{|\vec{\nabla} F(\vec{x})|}$$

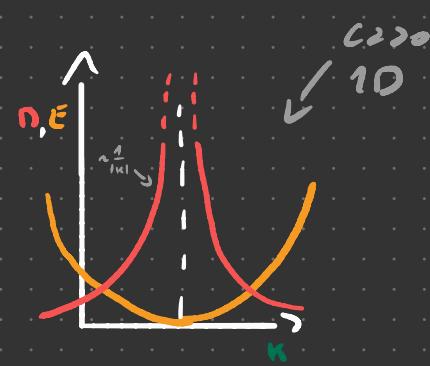
$$\int \delta(F(\vec{x})) d\vec{x} = \sum_{F=0} \frac{d\vec{x}}{|\vec{\nabla} F(\vec{x})|}$$

$$D(E) = \int_{E(\vec{K})=E} \frac{2Vd\vec{K}}{1/\vec{D}_K E(\vec{K})} \frac{1}{(2\pi)^3} \quad D_K = \vec{D}$$

Questa formula prevede che ci siano cose strane quando  $\vec{D}E = 0$

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

$$E(\vec{K}) = E_c + \frac{\hbar^2}{2m} \left( K_x^2 \pm K_y^2 \pm K_z^2 \right)$$



Partiamo dal C2D 1D

$$\vec{D}E = \frac{\hbar^2 \vec{K}}{2m}$$

**IMPRECISO**

Nel caso 2D conviene calcolare direttamente l'integrale

$$\frac{S}{\pi \hbar^2} \int \delta [E_c + \frac{\hbar^2}{2m} (K_x^2 + K_y^2) - E] dK_x dK_y = |q_i| = \sqrt{\frac{\hbar K_i}{2m}}$$

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

Questo integrale può avere due valori diversi:  
2 secondi dei casi:

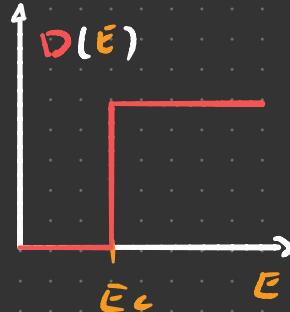
## Caso 1: segno concorde

Passo in Sferiche

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

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

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



## Caso 2: segno discorde

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

$$= \frac{Sm}{\pi^2 h^2} \int \sqrt{\frac{1}{E - q_x^2 - E_c}} \frac{dq_y}{4} \quad \text{Nel libro} \\ \text{non c'è il 4}$$

# Teorema 2 dell'accelerazione

Noi sappiamo che gli autovalori del Hamiltoniano sono tutti così

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

$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{x})$

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

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

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

dunque che

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

derivo queste 2 formule rispetto a  $\vec{h}$

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

$$= \hbar \langle n, \vec{h} | \frac{\vec{p}}{m} | n, \vec{h} \rangle = \vec{v}(\vec{h})$$

Quindi si ottiene l'importante equazione che dice che

$$\boxed{\frac{\partial E(\vec{h})}{\partial \vec{h}}} = \vec{v}(\vec{h})$$

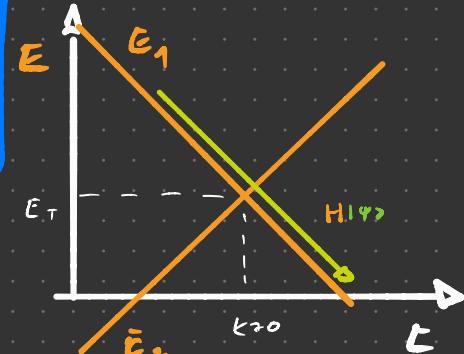
$$dE = \vec{F} \cdot \vec{v} dt = \vec{F} \cdot \frac{\partial E(\vec{h})}{\partial \vec{h}} dt$$

Visto che l'Energia è un differenziale esatto abbiamo che

$$\boxed{\vec{F} = \frac{d \vec{h}}{dt}}$$

# Tunneling di Zener

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



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

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

$$\Psi(t) = \begin{pmatrix} C_1(t) \\ C_2(t) \end{pmatrix}$$

$$\langle 1 | H | 1 \rangle = i\hbar \frac{\partial C_1}{\partial t} = C_1 E_1(t)$$

negativo

Suppongo che  $\begin{cases} E_1(t) = tE'_1 + E^T \\ E_2(t) = tE'_2 + E^T \\ E'_1 = -E'_2 \end{cases}$

$$\begin{cases} \frac{\partial C_2}{\partial t} = \frac{C_2}{i\hbar} (tE'_2 + E^T) \\ \frac{\partial C_1}{\partial t} = \frac{C_1}{i\hbar} (-tE'_1 + E^T) \end{cases}$$

$$\int \frac{dC_1}{C_1} = \int \frac{i}{\hbar} (E E_2^\dagger - E^\dagger) dt$$

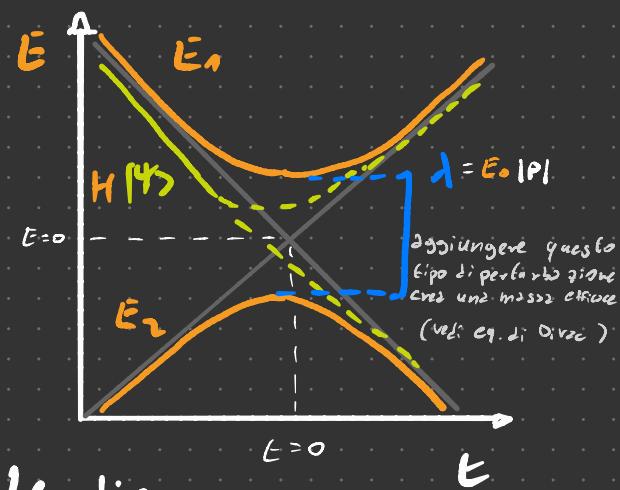
$$\ln \left( \frac{C_1(t)}{C_1(t=0)} \right) = \frac{i}{\hbar} \frac{\epsilon^2}{2} E_2^\dagger - \epsilon E^\dagger$$

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

$|C_1(t)|^2 = 1$  quindi un'particella non possiede due coordinate 211'21tvrz.

A questo supponiamo  $E$  che le energie siano tipo così

$$H = E_0 \begin{vmatrix} t & P^* \\ P & -t \end{vmatrix}$$



Nel limite in cui le linee d'energia tendono a quelle grigie si scopre che la transizione si identifica con quella tra E1 e E2 prima

$$\begin{cases} \frac{\partial c_1}{\partial t} = E E_0 C_1 + E_0 P C_2 \\ \frac{\partial c_2}{\partial t} = -t E_0 C_2 + E_0 P^* C_1 \end{cases}$$

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

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

$t^2, E_0^2, |P|^2$  sono le componenti lungo gli assi cartesiani dell'Hamiltonian.

$$E_0 \begin{vmatrix} t & P^* \\ -t & -t \end{vmatrix} \begin{vmatrix} C_1 \\ C_2 \end{vmatrix} = E_0 \sqrt{t^2 - |P|^2} \begin{vmatrix} C_1 \\ C_2 \end{vmatrix} \quad \begin{cases} \frac{\partial C_1}{\partial t} = \frac{E_0 \sqrt{t^2 - |P|^2}}{i\hbar} C_1 \\ \frac{\partial C_2}{\partial t} = -\frac{E_0 \sqrt{t^2 - |P|^2}}{i\hbar} C_2 \end{cases}$$

$$C_1(t=+\infty) = e^{-\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{E_0 \sqrt{t^2 - |P|^2}}{i\hbar} dt} = e^{-\frac{i E_0 |P|^3}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sqrt{t^2 - 1}}{|P|^2} dt} = e^{-\frac{i E_0 |P|^3}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \sqrt{x^2 - 1} dx}$$

$$= e^{-\frac{E_0 |P|^3}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \sqrt{1-x^2} dx} = \begin{cases} \text{noi sappiamo che } \int \sqrt{1-x^2} dx = \\ = \frac{x}{2} \sqrt{1-x^2} + \frac{\arcsin(x)}{2} \text{ per } -1 \leq x \leq 1 \end{cases}$$

$$= e^{-\frac{E_0 |P|^3}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \sqrt{1-x^2} dx} = e^{\underbrace{-\frac{E_0 |P|^3}{\hbar} \int_{-1}^1 \sqrt{1-x^2} dx}_{\text{Parte reale}}} e^{\underbrace{\frac{2 E_0 |P|^3}{\hbar} \int_1^{+\infty} \sqrt{1-x^2} dx}_{\text{Parte imm.}}}$$

L'idea per le rese è l'unica a contribuire all'ampiezza di probabilità, quindi ci limiteremo a usare quella.

$$\Rightarrow |Z_1|^2 \approx e^{\frac{i\pi E_0 |\vec{p}_1|^3}{\hbar}}$$

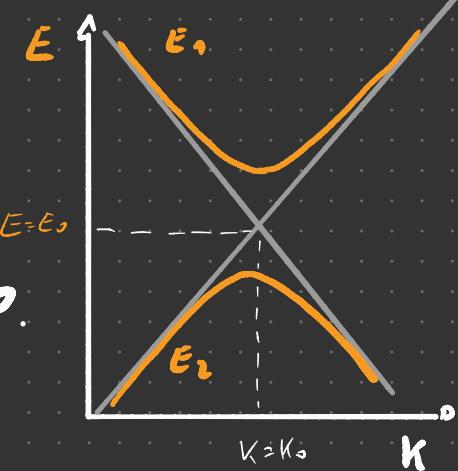
$$P_T = e^{\frac{i\pi E_0 |\vec{p}_1|^3}{\hbar}}$$

$$P_R = 1 - P_T$$

## 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  $\hbar \ddot{\vec{r}} = \vec{F}$ , se  $\vec{F}$  è costante nel tempo possiamo dire che  $\vec{k} = \frac{t}{\hbar} \vec{F}$ , che equivale a ricalcare gli zeri del problema precedente



# L'Hamiltoniana

$\vec{K} \cdot \vec{P}$

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

$$= e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} \left[ \left( \frac{(\vec{p} + \hbar \vec{K})^2}{2m} + V(\vec{x}) \right) u_n(\vec{x}) \right]$$

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

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

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

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

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

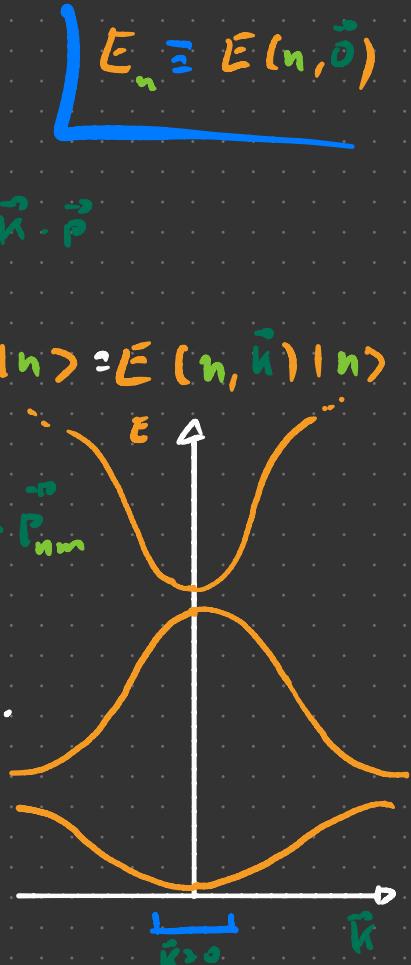
$$H(\vec{k}) = \frac{1}{2m} \left[ \hat{P}^2 + \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} + V(\vec{x}) \right] + \frac{\hbar}{m} \vec{k} \cdot \hat{P}$$

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

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

Fin qui tutto c'è esatto.

Vediamo che si potrebbe fare  
è restringersi a piccoli  $\vec{k}$ .



Visto che  $P_{nn} = 0$  (l'elettrone ha

velocità nulla) possiamo trovare  $-\frac{\hbar}{m} \vec{k} \cdot \hat{P}_{nn}$

Come una perturbazione al secondo ordine

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

L'equazione di dispersione c'è quadratica in  $\vec{k}$   
per  $\vec{k} \geq 0$ . Per indicare quanto c'è larghezza effettiva  
la parabola si usa il tensori di massa efficace

$$|\langle \psi_n | \vec{K} \cdot \vec{P} | \psi_{n'} \rangle|^2 = \sum_{\sigma, b} (\vec{K}^\sigma \cdot \vec{P}_{nn'}^\sigma)^* \vec{P}_{nn'}^b \cdot \vec{K}^b$$

$\frac{1}{m^2} \frac{\vec{P}_{nn'}^+ \vec{P}_{nn'}^b}{E_n - E_{n'}}$  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

$$\left( \frac{m}{m^*} \right)_{ab} = \delta_{ab} + \frac{2}{m} \frac{\vec{P}_{nn'}^+ \vec{P}_{nn'}^b}{E_n - E_{n'}}$$

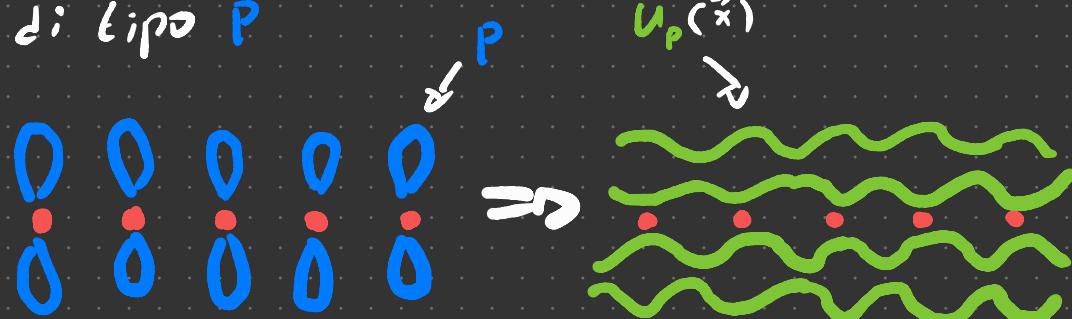
$$E(n, \vec{n}) \approx E_n + \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\sigma, b} \vec{K}^\sigma \left( \frac{m}{m^*} \right)_{ab} \vec{K}^b$$

# TIGHT BINDING

È possibile provare a intuire 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



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

La funzione d'onda sarà quindi tipo così

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

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

A questo punto si cercano gli autovalori della Hamiltoniana rispetto agli  $\Phi_i(\vec{r})$ :

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

$$\text{Det}[H_{ij}(\vec{r}) - ES_{ij}(\vec{r})] = 0$$

$$H_{ij} = \frac{1}{N} \sum_{\epsilon_1, \epsilon_2} e^{i \vec{R} \cdot (\vec{\epsilon}_2 - \vec{\epsilon}_1)} \langle \phi_i(\vec{x} - \vec{\epsilon}_1) | H | \phi_j(\vec{x} - \vec{\epsilon}_2) \rangle \\ = \sum_{\epsilon} e^{i \vec{R} \cdot \vec{\epsilon}} \langle \phi_i(\vec{x}) | H | \phi_j(\vec{x} - \vec{\epsilon}) \rangle = \\ \sum_{\epsilon, \epsilon'} e^{i \vec{R} \cdot \vec{\epsilon}} \langle \phi_i(\vec{x}) | \frac{p^2}{2m} | \phi_j(\vec{x} - \vec{\epsilon}) \rangle + \underbrace{\langle \phi_i(\vec{x}) | V_s(\vec{x} - \vec{\epsilon}) | \phi_j(\vec{x} - \vec{\epsilon}) \rangle}_{\substack{\text{Potenziale} \\ \text{del singolo} \\ \text{Atomo}}}$$

Questa matrice è molto complicata da calcolare, quindi si fanno delle approssimazioni.

Se  $\vec{E} = \vec{E}' = 0$  la matrice

$F_2(E; \delta_{ij})$  dove  $E$  è l'energia del singolo orbitale i-esimo e contribuisce all'Ordine zero.

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

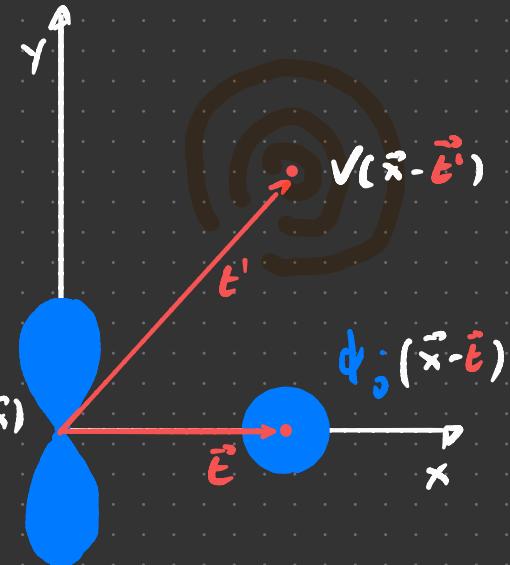
Il contributo con l'ordine più grande dopo il caso  $\vec{E} = \vec{E}' = 0$  è quello in cui  $\vec{E} = \vec{E}' \neq 0$  oppure  $\vec{E}' = 0 \neq \vec{E}$ , quindi:

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

$$\approx \langle \psi_i(\vec{x}) | V_s(\vec{x} - \vec{E}') | \psi_j(\vec{x} - \vec{E}) \rangle (\delta_{cc} + \delta_{co})$$

è possibile approssimare ulteriormente limitando  $E$  e  $E'$  alle celle vicine l'origine.

Di solito questi tipi di valori sono tabulati.



# Dinamiche dei Solidi

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

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

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

$\hat{E} = E_0(\{\vec{r}_{A_i}\})$

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

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

A questo punto svilupperemo l'energia per avere le piccole oscillazioni:

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

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

Diagona lizzando  
questa matrice

si trovano i modi  
normali

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

Tutti questi ragionamenti è possibile solo se  $E_0$  non è degenero nelle zone d'interesse, senz'è un casino

Dove in poi indicheremo con  $i \in A_i$  e  $D_{i,j} \equiv \frac{\partial^2 E_0}{\partial \vec{r}_{A_i} \partial \vec{r}_{A_j}} \mid \min$

  
**Cristallo Monatomico**

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

Le proprietà di  $D$  sono:

$$1) D_{i,j} = D_{j,i} \leftarrow \text{Inversione sotto scambio}$$

Fissati gli indici  $i, j$   
 $D_{i,j}$  è una Matrice  $N \times N$   
 dove  $N$  è la dim. del Cristallo  
 (Grafe N=2, N=6 N=3, ...)

$$2) \sum_{i,j} D_{i,j} = 0 \leftarrow \text{Invarianza sotto traslazioni}$$

$$3) \sum_j D_{i,j} > 0$$



Se sposto 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 contigui tra di loro

Adesso cerchiamo di riceverci i modi normali detti anche Fononi.

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

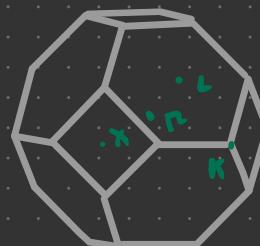
$m\omega^2 \vec{A} = D_{ij} e^{i\vec{k}(\vec{r}_j - \vec{r}_i)} \vec{A}$  Così facendo il problema diventa

$$\overbrace{D(\vec{k})}$$

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

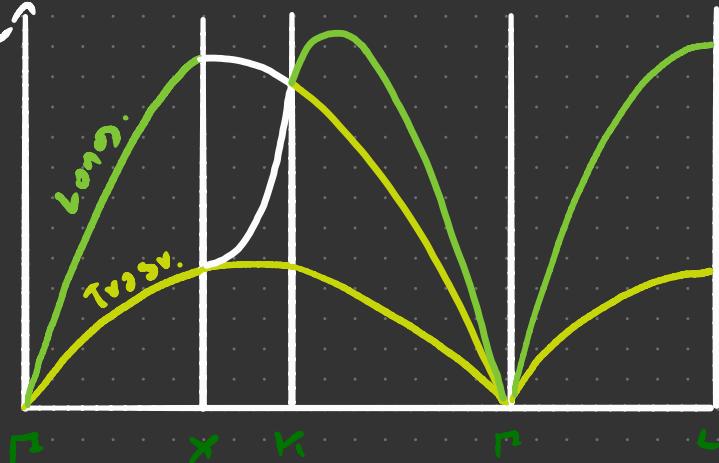
Per ogni  $\vec{k}$  ci saranno

3 w (una per ogni polizz.)



12 stz  
21 centro

Ad Esempio  $w^\uparrow$   
per l'alluminio i Fononi nella  
prima zona di  
Brillouin sono  
così  
(Fcc)



# {Cristallo} Polietomico}

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

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

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

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

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

A questo punto si suppone che la soluzione abbia 12 forme

$$r_i^v = A^v e^{i K \cdot \vec{r}_i^v + \text{int}}$$

$$m^v \ddot{r}_i^v = - \sum_{v'j} D_{ij}^{vv'} r_j^{v'} \quad m^v w^2 A^v = \sum_{v'j} \frac{D_{ij}^{vv'} - i \epsilon_{ijk} (E_j^v - E_i^v)}{D^{vv'}(\vec{K})} A^{v'}$$

$$\det [D^{vv'}(\vec{K}) - m^v w^2 S^{vv'} I_d] = 0$$

Questo ci assicura che per ogni valore di  $\vec{K}$  ci sono  $3n$  (numero di atomi nella cella) valori di  $w$

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

# Calori Specifici

Se uno si vuol scrivere l'Hamiltoniano espresso nei termini degli operatori di creazione e distruzione dei fononi esso risulta essere

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

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

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

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

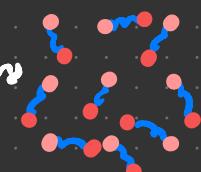
$$= \frac{1}{k_B T} \sum_{\vec{k}, \vec{p}, p} \left( \frac{\hbar \omega}{T} \right)^2 \frac{e^{\frac{\hbar \omega}{kT}}}{\left( e^{\frac{\hbar \omega}{kT}} - 1 \right)^2} = \frac{1}{k_B T} \sum_{\vec{k}, \vec{p}, p} \left( \frac{\hbar \omega}{T} \right)^2 \cosh^{-2} \left( \frac{\hbar \omega}{2kT} \right)$$

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 approssima  
simmetricamente  
(T grandi)



## Modello di Debye

Visto che  $\omega = c k T$  dove c è la velocità del suono, si tengono in considerazione solo i modi normali



# Effetti Anzemonici e Squagghiamento

(F<sub>2</sub>TE0.m1c)

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...

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

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

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

$$i \hbar K + \frac{A}{\vec{k}} = \sqrt{N} \vec{j}_{12} \quad A = i \hbar N = \sqrt{N} \vec{j}_{12} \quad \frac{A}{\vec{k}} = \frac{2 + e^t}{2^3 \pi \sqrt{N}}$$

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

Quindi

$$\vec{r}_i = \sum_{\vec{R}} [\vec{z}(\vec{R}) + \vec{z}^+(\vec{R})] e^{i \vec{K} \cdot \vec{R}} \cdot i \omega$$

Tutto questo ambiguo è stato fatto per calcolare le distanze quadratiche medie del punto di equilibrio, se queste distanze superavano certe soglie, allora il cristallo diventava liquido

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

$$= \sum_{\vec{R}} \frac{\hbar}{Nwm} \left[ \frac{1}{2} + 2\vec{z}^+ + \frac{\vec{z}^2 + \vec{z}^{+2}}{2} \right]$$

Questi termini fanno zero quando si vede estendere la media con la matrice di densità

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

$$= \sum_{\vec{R}} \frac{\hbar V}{Nwm} \left[ \frac{1}{2} + \frac{1}{e^{-\frac{E_R}{kT}} - 1} \right] =$$

$w$  non va da 0 a  $\infty$ , va da 0 a  $w_0$ .  
(vedi disegno)  
(sol di dip)

$$= \int \frac{\hbar V}{Nwm} \left[ \frac{1}{2} + \frac{1}{e^{-\frac{w}{kT}} - 1} \right] \frac{k^2 dK}{2\pi^2} = \left( K = \frac{w}{c} \right)$$

$$\hookrightarrow = \int \frac{\hbar w V}{Ncm} \left[ \frac{1}{2} + \frac{1}{e^{-\frac{w}{kT}} - 1} \right] \frac{dw}{2\pi^2} \quad \text{Debye}$$

$w_0$  è quella pulsazione che avviene quando la sfera di raggio  $K$  ha lo stesso volume della prima zona di Brillouin

$$\frac{4\pi}{3} N_D^3 = \frac{8\pi^3}{52} = \frac{N_0^3 \pi^3}{V} \quad w_D^3 = \frac{N_0 \pi^2}{V}$$

$$\frac{k_b T^2 V}{2\pi^2 \hbar N c^3 m} \int_0^{w_D} \frac{k_b w}{K_b T} \left[ \frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\frac{w}{k_b T}} - 1} \right] \frac{dw}{K_b T} =$$

$$= \frac{k_b T^2 V}{2\pi^2 \hbar N c^3 m} \int_0^{x_0} \times \left[ \frac{1}{2} + \frac{1}{e^x - 1} \right] dx \quad x_0 = \frac{h N_0 \pi^2}{K_b T V}$$

Nel caso in cui  $T$  è grande l'integrale diventa

$$\frac{k_b T^2 V}{2\pi^2 \hbar N c^3 m} \int_0^{x_0} \frac{x}{2} + \frac{x}{1+x-1} dx :$$

$$= \frac{k_b T^2 V}{2\pi^2 \hbar N c^3 m} \frac{h N_0 \pi^2}{K_b T V} = 3 \frac{K_b T}{c^3 m}$$

$$\text{Consideriamo adesso } F = \sqrt{\langle r_x^2 \rangle + \langle r_y^2 \rangle + \langle r_z^2 \rangle}$$

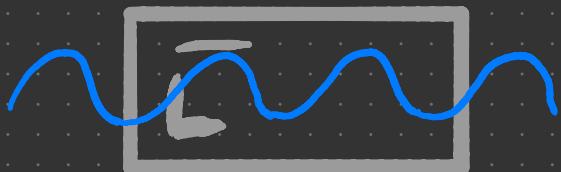
$r_0 < \text{raggio medio cella fondamentale}$

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:

$$\frac{3}{c^3} \sqrt{\frac{K_b T_s}{m}} \frac{1}{r_0} = F_c \quad \boxed{T_s = \frac{F_c^2}{3} \frac{r_0^2}{c^3} \frac{m}{K_b}}$$

# PolariTroni

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



(Il cristallo è bipolare)

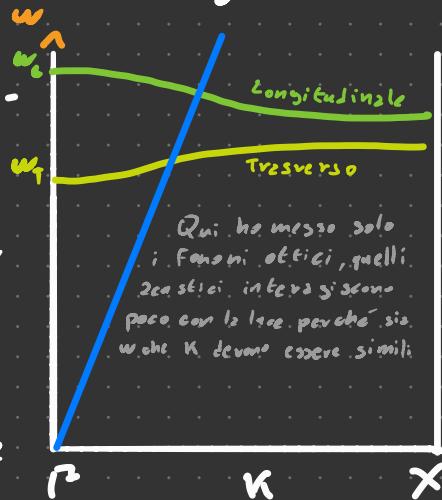
Noi siamo interessati di vedere come i fenomeni interagiscono con l'onda.

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

In questo caso l'Ham. è separabile e gli autovalori sono semplicemente il Fotone per i fatti suoi con la sua energia e i fenoni pure.

Se accendiamo l'interazione ci aspettiamo che gli autovalori dell'Ham. siano 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 lunghezze d'onda in analisi sono alte (radio - microonde - infrarosso).

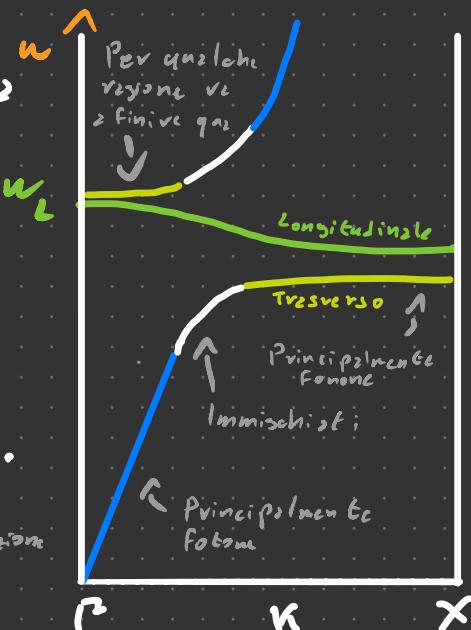


Qui ho messo solo i Fenoni ottici, quelli 2a st. interagiscono poco con la luce perché sia w1, w2, K devono essere simili.

Gli stati si mischiano principiamente quando si  $w$  che  $K$  sono simili.

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

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



Adesso facciamo i conti.

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

Se supponendo che tutti i fononi di tutte le polarizzazioni oscillino alla stessa frequenza  $\omega_0$  per ogni  $i$  (approssimazione).

Se consideriamo che nei fononi ottici gli atomi delle celle Fond.

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

$$\ddot{d}_i = -\omega_0^2 \vec{d}_i + \frac{q^2 \vec{E}}{m} \quad \text{Adire il vero questo è un mezzo ridotto}$$

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

Primo non l'ho detto, ma qui ho usato un reticolo con 2 atomi nella cella Fond. e con una struttura cubica (tipo  $MgCl_2$ ). Gli Ioni hanno una carica eff:  $q$



Per qualche ragione che non ci è dato sapere

$$\frac{N \underline{q^2}}{\underline{V m}} = \omega_0^2 \frac{\epsilon_s - \epsilon_{\infty}}{4\pi}$$

dove  $\epsilon_s$  è la costante dielettrica relativa nel caso in cui il campo è statico, mentre  $\epsilon_{\infty}$  è la costante dielettrica relativa del mezzo a frequenze molto più alte delle frequenze di oscillazione dei Fotonini, ma comunque molto più basse delle frequenze necessarie per eccitare gli atomi.

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

$$\epsilon_s \vec{E} = \vec{E} + q\vec{u} (\vec{P} + \vec{P}_{el})$$

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

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

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

Quindi

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

Queste equazioni hanno due termini:  
Il primo è quello ionico e il secondo quello elettronico.  
Gli elettronni si muovono adibaticamente anche fino a frequenze molto più alte di quelle dei Fotonini, quindi la costante dielettrica relativa  $\epsilon_e$  rimane invariata per tutte le frequenze in esame. Il termine Fotonico invece scompare.

Se invece prendiamo queste equazioni di prima sempre nel caso statico

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

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

Queste due equazioni possiamo mettere a sistema

$$\begin{cases} \omega_0^2 \vec{P} = \frac{N}{V} \frac{q^2 \vec{E}}{m} \\ \vec{P} = \frac{\epsilon_s - \epsilon_\infty}{4\pi} \end{cases} \Rightarrow \omega_0^2 \frac{\epsilon_s - \epsilon_\infty}{4\pi} = \frac{N}{V} \frac{q^2}{m}$$

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

$$\boxed{\ddot{\vec{P}}(\vec{r}, t) = \omega_0^2 \left( \frac{\epsilon_s - \epsilon_\infty}{4\pi} \vec{E}(\vec{r}, t) - \vec{P} \right)}$$

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

Troviamo separatamente i due tipi di polarizzazione

# Polari troni Traversali

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

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

Supponiamo che i mezzi non abbiano proprietà magnetiche (volendo basterebbe anche che  $H$  sia lineare in  $B$ , ma va bene)

$$\nabla \times \nabla \times \vec{E} = \nabla(\nabla \cdot \vec{E}) - \nabla^2 \vec{E} = jA \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial t} \nabla \times \vec{B} =$$

$$= -\frac{\partial^2}{\partial t^2} \vec{D} = \frac{w^2}{c^2} \vec{D} = \frac{w^2}{c^2} (\epsilon_0 \vec{E}_0 + q\pi \vec{P}_0)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{E}_0 \left( K^2 - \frac{w^2}{c^2} \epsilon_0 \right) = -q\pi \vec{P}_0 \\ -w^2 \vec{P}_0 = w_0^2 \left( \frac{\epsilon_0 - \epsilon_\infty}{q\pi} \vec{E}_0 - \vec{P}_0 \right) \end{array} \right.$$

$$\det \begin{vmatrix} K^2 - \frac{w^2}{c^2} \epsilon_0 & q\pi \\ w_0^2 \frac{\epsilon_0 - \epsilon_\infty}{q\pi} & w_0^2 - w^2 \end{vmatrix} = 0 \quad \text{Fazendo i conti si ottiene che}$$

$$w^2 = \frac{1}{2\epsilon_0} \left[ w_0^2 \epsilon_0 + c^2 K^2 \pm \sqrt{(w_0^2 \epsilon_0 + c^2 K^2)^2 - 4 w_0^2 c^2 K^2 \epsilon_\infty} \right]$$

# Polaritoni longitudinali

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

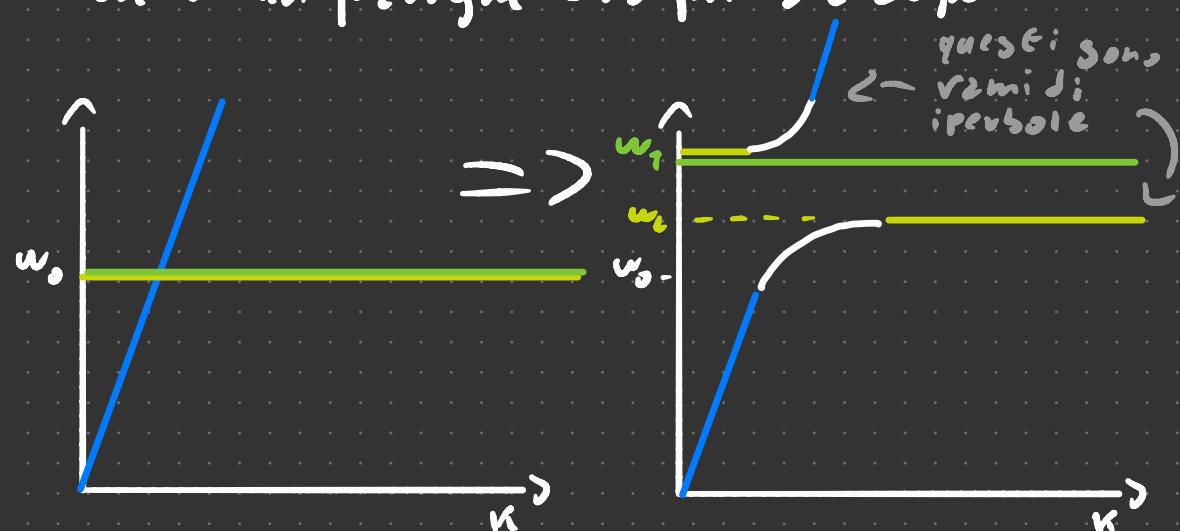
quindi:  $\vec{D} \parallel \vec{\kappa}$ , ma allora  $\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = \vec{\kappa} \cdot \vec{D} = 0$

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

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{P}_0 = -\frac{\epsilon_{00}}{9\pi} \vec{E}_0 \\ -\omega^2 \vec{P}_0 = \omega_0^2 \left( \frac{\epsilon_s - \epsilon_{00}}{9\pi} \vec{E}_0 - \vec{P}_0 \right) \end{array} \right.$$

$$\omega^2 \vec{P}_0 = \omega_0^2 \vec{P}_0 \left( 1 + \frac{\epsilon_s - \epsilon_{00}}{\epsilon_{00}} \right) \rightarrow \omega_0^2 \frac{\epsilon_s}{\epsilon_{00}} = \omega_c^2$$

Faccendo un prezzo tra prima e dopo



# III PLASMON<sub>(I)</sub>

I plasmoni, così come i polarizzatori, sono delle quazzi - particelle che saltano fuori dall'interazione tra elettroni e il campo Elettromagnetico.

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

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

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

$$E_{\text{el}} = -\nabla \cdot P = ne(\vec{k} \cdot \vec{r}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r} - i\omega t}$$

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

Visto che non ci sono cariche libere  $\nabla \cdot D = 0 = \nabla \cdot (E + \epsilon_0 \nabla P)$

$$\frac{1}{\epsilon_0} \nabla \cdot E = -\nabla \cdot P = ne(\vec{k} \cdot \vec{v}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r} - i\omega t}$$

Forza di Lorentz

$$F = q\vec{v} \times \vec{B} = q\vec{v} \times (\vec{k} \times \vec{E}) = q\vec{v} \times \vec{\epsilon} E$$

$$m\ddot{\vec{u}}(\vec{r}, t) = -q\vec{v} \times \vec{\epsilon} E$$

$$\text{Quindi: } \omega^2 = \frac{q\vec{v} \cdot \vec{\epsilon} E^2}{m}$$

# Teoria della Conduzione

Dall'equazione di Fermi-Dirac noi sappiamo che la distribuzione delle energie è qualcosa tipo  $\bar{n}_0 = [e^{\frac{E-E_0}{k_B T}} + 1]^{-1}$  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 ritrovare all'equilibrio e assumere  $\bar{n}(\vec{x}, \vec{k}, t)$ .

Se per caso uscissi fuori dall'equilibrio ci sarebbe un termine collisionale  $I_{\text{coll}}$  che si occuperebbe 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

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

$$\left\{ \begin{array}{l} d\vec{x} = \vec{v}(\vec{r}) dt = \frac{\partial \vec{E}(\vec{r})}{\partial \vec{r}} dt \\ d\vec{v} = \frac{d\vec{u}}{dt} dt = -\frac{e}{m} \vec{E} dt \end{array} \right.$$

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

L'espressione "Vera" di  $I_{\text{coll}}$  è del tipo

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

Indica la probabilità per unità di tempo di passare da  $K' \rightarrow K$

$$= \frac{1}{(2\pi)^3} \int P_{K \rightarrow K'} \bar{n}_{K'} \underbrace{[1 - \bar{n}_K]}_R - \underbrace{P_{K' \rightarrow K} \bar{n}_K [1 - \bar{n}_{K'}]}_R d\vec{v}'$$

Indice quante particelle ci sono in  $K'$

Indice quante particelle mancano in  $K$

R. Indice l'effetto opposto del primo termine

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

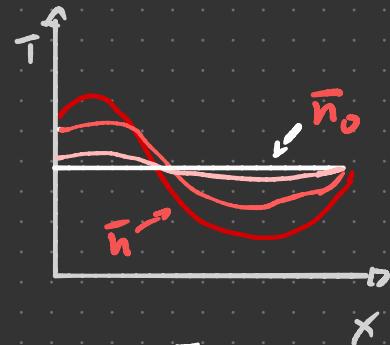
$$I_{\text{coll}} = \frac{\bar{n}_0 - \bar{n}}{\tau}$$

Questo sta a significare che il sistema tenderà all'equilibrio esponenzialmente in modo analogo a quello che succede con l'equazione del calore.

Così fecero però il T  
ritrovare un incognita.

Alla fine l'equazione viene così

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



## Caso con campo elettrico statico

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

$$\frac{\partial \bar{n}}{\partial E} \approx \frac{\partial \bar{n}_0}{\partial E} = \frac{\partial \bar{n}_0}{\partial E} \frac{\partial E}{\partial \bar{n}_0} = - \frac{e^{\frac{E-u}{k_B T}}}{k_B T} \frac{\vec{v}(\bar{u})}{[e^{\frac{E-u}{k_B T}} + 1]^2} = - \frac{\vec{v}(\bar{u})}{k_B T} \cosh^{-2} \left[ \frac{E-u}{2 k_B T} \right] \text{ per } T \rightarrow 0 \text{ questa equazione divenirebbe}$$

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

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

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

per calcolare le correnti bisogna ricordarsi che  $\bar{n}(\vec{x}, \vec{r}, t) \frac{d^3\vec{x} d^3\vec{r}}{4\pi^3}$  è la probabilità che un elettrone si trovi nel volume dello spazio delle F2s,  $d^3\vec{x} d^3\vec{r}$ .

$$\begin{aligned}\vec{j} &= -e \int \bar{n}(\vec{x}, \vec{r}, t) \mathbf{v}(\vec{r}) \frac{d^3\vec{x} d^3\vec{r}}{4\pi^3} = \\ &= -e \left\{ \bar{n}_0 \mathbf{v}(\vec{r}) - \gamma e \delta(E - u) \hat{\mathbf{v}} \cdot \vec{E} \hat{\mathbf{v}}(\vec{r}) \right\} \frac{d^3\vec{r}}{4\pi^3} \\ &= \gamma e^2 \vec{E} \cdot \int \delta(E - u) \mathbf{v} \otimes \mathbf{v} \frac{d^3\vec{r}}{4\pi^3}\end{aligned}$$

$$S[\delta(E(\vec{r}) - u)] d^3\vec{r} = dS / \left| \frac{\partial E}{\partial \vec{r}} \right|$$

$$\vec{j} = \vec{E} \cdot \gamma e^2 \underbrace{\int_S \frac{\mathbf{v} \otimes \mathbf{v} dS}{10 \in 1 4\pi^3}}_{\sigma_{ij}} \quad \begin{array}{l} \text{Tensori di} \\ \text{condutibilità} \\ \sigma_{ij} \end{array}$$

Questo integrale non è in generale semplice da calcolo, però se l'elettrone è quasi libero  $E \approx \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \rightarrow |\partial_x E| \approx \frac{\hbar^2 K}{m}$   $dS = x_F^2 d\Omega$

$$\int_S \frac{\mathbf{v} \otimes \mathbf{v}}{10 \times E} \frac{dS}{4\pi^3} = \frac{m K_F}{\hbar^2} \frac{1}{4\pi^3} \int_S \mathbf{v} \otimes \mathbf{v} d\Omega$$

$$\mathbf{V} \otimes \mathbf{V} = \begin{vmatrix} V_x^2 & V_y V_x & V_z V_x \\ V_y V_x & V_y^2 & V_z V_y \\ V_z V_x & V_z V_y & V_z^2 \end{vmatrix}$$

Quando integro su  $dS$ : 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  $V_x^2 + V_y^2 + V_z^2 = |V|^2$

$$\int \mathbf{V} \otimes \mathbf{V} dS = \frac{|V|^2}{3} \delta_{ij} \int dS = \frac{q\pi}{3} |V|^2 \delta_{ij}$$

$$|V|^2 = \left| \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial \vec{n}} \right|^2 = \frac{h^2 K_F^2}{m^2}$$

$$J = \gamma e^2 \frac{m^* K_F}{h^2} \frac{\vec{E}}{8\pi^3} \frac{q\pi h^2 K_F^2}{3 m^2} =$$

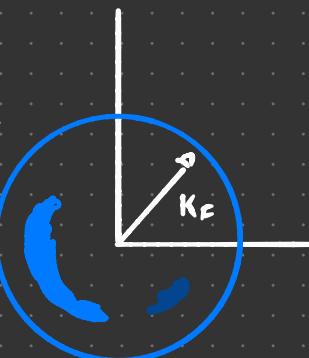
$$= \frac{\gamma e^2 K_F^3 \vec{E}}{3 \pi^2 m^*}$$

Nos sappiamo che il numero di occupazione media di elettroni in un volume  $\Omega^3 / h^3$  è  $\sqrt{h^3 N / \pi^3}$

Integrando nello spazio delle fasi e sfruttando il fatto che la Fermi direzione va a gradino si ottiene

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

$$\frac{q\pi K_F}{3} \cdot \frac{1}{8\pi^3} = n$$



Numero di elettroni per unità di volume

$$J = \boxed{\frac{\gamma e^2 n |\vec{E}|}{m^*}}$$

# Corrente Alternata

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

Qui cercheremo di essere più raffinati  
 Extratteremo  $\bar{h}$  perturbativamente in modo  
 da poter avere, volendo una precisione  
 arbitrariamente buona, ma poi ci  
 restringeremo al prim'ordine

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

$\bar{h}_0$  è lineare in  $\vec{E}_0$ , quindi Extratteremo  
 $\vec{E}_0$  come se fosse al prim'ordine

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

$$+ \frac{\partial \bar{h}_0 + \bar{h}_1 + \dots}{\partial t}$$

A questo punto si egualano le equazioni ordine per ordine

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \bar{n}_0}{\partial x} \cdot \vec{v} + \frac{\partial \bar{n}_0}{\partial t} = 0 \\ - \frac{\bar{n}_1}{T} = \frac{\partial \bar{n}_1}{\partial x} \cdot \vec{v} - \frac{\partial \bar{n}_0}{\partial \vec{h} \cdot \vec{h}} \cdot e^{\vec{E}_0} e^{i \vec{h} \cdot \vec{x} - i w t} + \frac{\partial \bar{n}_1}{\partial t} \\ - \frac{\bar{n}_2}{T} = \frac{\partial \bar{n}_2}{\partial x} \cdot \vec{v} - \frac{\partial \bar{n}_1}{\partial \vec{h} \cdot \vec{h}} \cdot e^{\vec{E}_0} e^{i \vec{h} \cdot \vec{x} - i w t} + \frac{\partial \bar{n}_2}{\partial t} \\ \vdots \\ - \frac{\bar{n}_n}{T} = \frac{\partial \bar{n}_n}{\partial x} \cdot \vec{v} - \frac{\partial \bar{n}_{n-1}}{\partial \vec{h} \cdot \vec{h}} \cdot e^{\vec{E}_0} e^{i \vec{h} \cdot \vec{x} - i w t} + \frac{\partial \bar{n}_n}{\partial t} \end{array} \right.$$

Risolendo un'equazione dopo l'altra si ottiene una precisione sempre maggiore

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

Ignoriamo le prime eq. poche sappiamo già come fa

$$\frac{\Phi}{T} = i \cancel{\Phi} \vec{h} \cdot \vec{v} - \frac{\partial \bar{n}_0}{\partial E} e^{\vec{v} \cdot \vec{E}_0} - i w \cancel{\Phi}$$

$$\cancel{\Phi} \left( \frac{1}{T} + i \vec{h} \cdot \vec{v} - i w \right) = - e \frac{\partial \bar{n}_0}{\partial E} \vec{v} \cdot \vec{E}_0$$

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

$$\vec{J}(t) = -e \int \hat{h}(x, k, \epsilon) \vec{v} \frac{d^3 k}{8\pi^3}$$

$$\vec{J}_n(t) = -\frac{e\tau}{1 + i\tau(\vec{k} \cdot \vec{v} - \omega)} \left\{ \frac{\partial \bar{n}_0}{\partial E} (\vec{v} \otimes \vec{v}) \cdot \vec{E} \right\} \frac{d^3 k}{8\pi^3}$$

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

$$\vec{J}_n(t) = -\frac{e\tau \vec{E}}{1 - i\tau\omega} \cdot \int \frac{\partial \bar{n}_0}{\partial E} \vec{v} \otimes \vec{v} \frac{d^3 k}{8\pi^3}$$

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

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

Tensore di  
condutibilità  
a corrente  
continua

# Teoría del Transporto con gradientes de Temperatura

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

consideriamo  
corrente continua

$$I_{\text{coll}} dt = \frac{\partial \bar{n}_0}{\partial \vec{x}} \cdot \vec{x} + \frac{\partial \bar{n}_0}{\partial \vec{E}} \cdot d\vec{E} + \frac{\partial \bar{n}_0}{\partial t} dt$$

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

$$\bar{n} = \bar{n}_0 + \bar{n}_1 + \dots + \bar{n}_n + \bar{n}_\infty$$

$$0 = \frac{\partial \bar{n}_0}{\partial t} \quad \checkmark \quad \frac{\partial \bar{n}_0}{\partial t} \text{ è } \bar{n}_0 \text{ perché } e \cdot t \text{ cambia poco con } \vec{x}, \\ \text{questo non è più vero se la corrente è alternata.} \\ (\text{Perché?})$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Per semplificare la notazione si definisce

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

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

$$\vec{J}(\vec{x}) = -e K_u \frac{\partial T}{T} + e K_u [E + e \vec{E}]$$

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

Dalla termodinamica si ha che

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

$$dN(k,x) = \bar{n}(k,x) d\vec{x} d^3 k \quad \tilde{v} dQ = d\vec{s} d^3 x < \sim$$

$$dQ = (u - E) \bar{n} d\vec{x} d^3 \bar{n}$$

$$d\vec{s} = (u - E) \bar{n} \tilde{v} d^3 \bar{n}$$

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

In teoria dovrebbe essere  $\vec{Q} \cdot \vec{s} = \frac{\partial Q}{\partial t}$ , ma  
si suppone che il calore viene trasportato  
dagli elettroni in modo statistico,  
quindi  $\tilde{v} dQ = d\vec{s} d^3 x$

## Corrente di Calore

$$\vec{j} = K_1 (\tilde{v} u + e \vec{E}) - K_2 \frac{\vec{D} T}{T}$$

$$\vec{j} = K_0 (\tilde{v} u + e \vec{E}) - K_1 \frac{\vec{D} T}{T}$$

## Corrente Elettrica

Ricordati che  
i  $K_i$  sono tensori

# MAGNETISMO

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

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

Da ora in poi supponiamo che il potenziale sia 2 buoni infinitamente slitti.

Proviamo prima ad trattare il caso in cui gli elettroni si muovono in un lasso poggiato sul piano x-y e il campo magnetico diretto lungo z

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

Scegli  $\vec{A} = -y B \hat{x}$

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

Scegli una soluzione del tipo

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

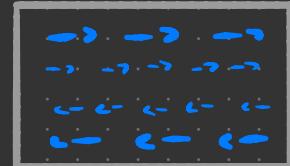
$$H = \frac{1}{2m} \left( \hbar k_x - \frac{e y B}{c} \right)^2 + \frac{p_y^2}{2m} =$$

Dunque come il  $k_x$  dipende da  $y_0$

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

$$\frac{m \omega_c^2}{2} y_0$$

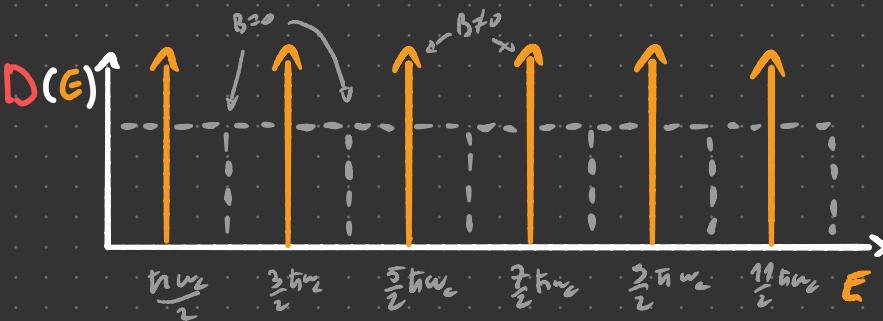
$$= \frac{m \omega_c^2}{2} (y - y_0)^2 + \frac{p_y^2}{2m}$$



Se si usano i somme due stati vicini si ottiene un moto che gira e il flusso è il flusso fondamentale  $\Phi_0 = \Phi_0 n$

Questo  $H_{2m}$  è uguale a quello di un oscillatore armonico con pulsazione  $\omega_c$  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 sono tanti elettroni quanti ce ne entrirebbero in un rettangolo tristezzoso.

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

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{eB}{c} K_x \leq L_y \rightarrow K_x \leq \frac{eB L_y}{c h} \\ eB \end{array} \right.$$

$\Phi_0$  è il flusso fondamentale  $\frac{e}{h}$

$$e^{iK_x L_x} = 1 \rightarrow K_x = 2n\pi/L_x$$

$$n \leq \frac{eB S}{c 2\pi h} \quad \text{La degenerazione } \frac{eBS}{ch} = \frac{\Phi}{\Phi_0}$$

Adesso lavoriamo in 3D

$$H = \frac{1}{2m} \left[ \left( P_x - \frac{eYB}{c} \right)^2 + P_y^2 + P_z^2 \right] =$$

$$\Rightarrow \frac{1}{2m} \left[ \left( hK_x - \frac{eYB}{c} \right)^2 + P_y^2 + P_z^2 \right] =$$

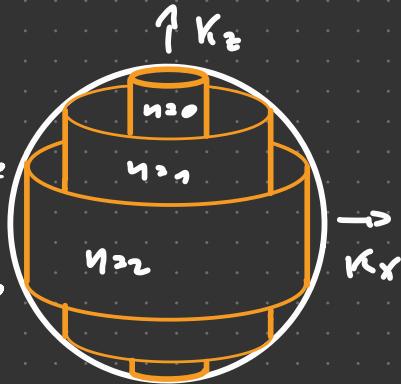
$$= \frac{1}{2m} \left( \frac{eB}{c} \right)^2 \left( \frac{hK_x c}{eB} - Y \right)^2 + \frac{P_y^2 + P_z^2}{2m} =$$

$$= m \omega_c^2 (Y - Y_0)^2 + P_y^2 + P_z^2$$

$$E = \hbar \omega_c \left( n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar K_z^2}{2m}$$

Questo è equivalente ad essere ristrette nello spazio delle Fazi: a delle zone cilindriche con l'asse lungo  $l_2 \hat{z}$  e la circonferenza di base con raggio

$$r_n = \sqrt{\hbar w_c (n + \frac{1}{2})}$$



Quindi le sfere di Fermi diventano un insieme di cilindri uno dentro l'altro.

L'densità di stato non è altro che

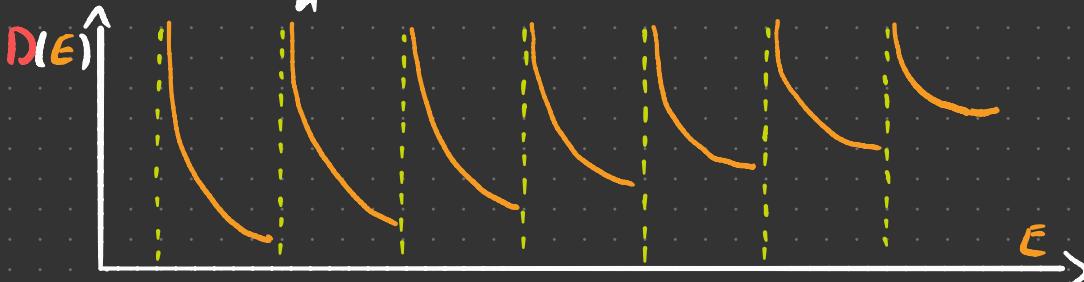
$$D(E) = N_c(B) 2 \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \int \delta \left[ E - \hbar w_c(n + \frac{1}{2}) + \frac{\hbar^2 K_z^2}{2m} \right] \frac{2K_z}{2\pi z} \frac{dx_z}{x_z} dz$$

lo spazio delle Fazi strato lungo  $l_2 \hat{z}$

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

$$= \frac{L_z \sqrt{2m}}{\hbar} \frac{eB}{ch} \sum_{n=0}^{+\infty} \int \delta \left[ q - (E - \hbar w_c(n + \frac{1}{2})) \right] \frac{1}{\sqrt{q}} dq$$

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



# 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.

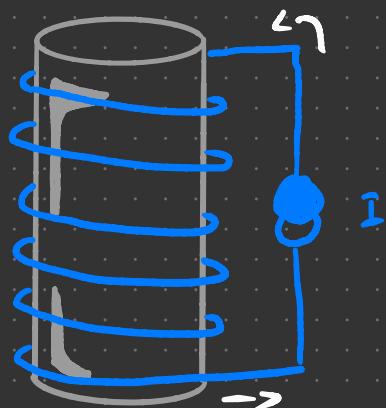
Dall'eq. d' Maxwell si ha che  $H = \frac{nI}{l_0}$  dentro al solenoide.

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

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

$$= \sum_{\text{spira}} (\vec{H} - \vec{M}) \cdot d\vec{s} = H S_s - M S \quad dE = I n V dM = \mu_0 V H dM$$

Lavoro fatto sulla superficie Spira  
Spira, non sull'oggetto



Quindi l'equazione termodinamica dell'energia è

$$dE = TdS - PdV + qdN + q_0 V \text{H} dM$$

Il Grossu dice che  $M = -\frac{1}{q_0 V} \frac{\partial E_0}{\partial H}$ , lo non so come si dimostra.

L'unica mazza dimostrazione che mi passa per i testi e' queste. ( $T=0, dV=0, dN=0$ )

$$dE = q_0 V \text{H} dM \Rightarrow d(E - q_0 V \text{H} M) = -q_0 V M dH$$

Ma questo e' vero solo se  $M=0$  allora stato fond.  
E non e' sempre vero.

$$\text{Inoltre affermo che } M(T) = -\frac{1}{q_0 V} \frac{\partial F}{\partial H}.$$

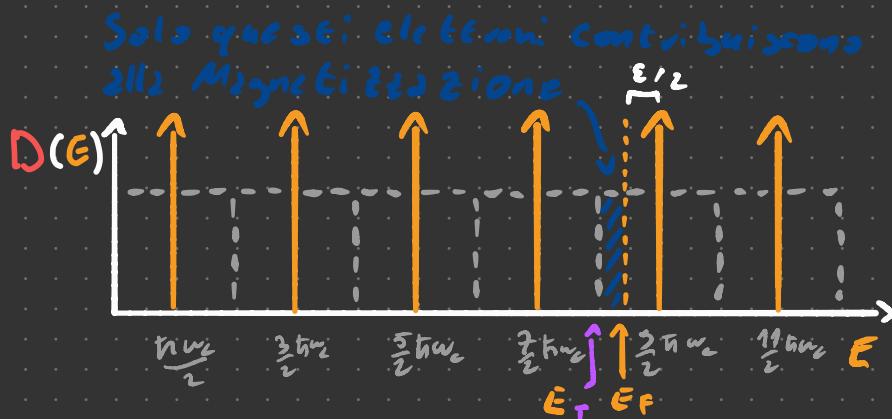
I conti sono gli stessi: a parte il fatto che per mantenere  $T$  costante si usi  $F$  al posto di  $E$ .

Adesso vediamo come usare queste equazioni cedute 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 fate prima sicuramente supposto che  $B$  era il campo che ci sarebbe stato se l'oggetto magnetizzato non fosse stato lì, quindi e' uguale ad  $H$ .

Consideriamo il gas di elettroni bidimensionale.  
 Gli unici elettroni che contribuiscono sono quelli in figura.



Perché essi vengono spinti verso le delta di Dirac più vicine, quindi l'energia aumenta o diminuisce a secondi di dove si trova la  $\delta$ .

$$\begin{aligned} \Delta E(B) &= (E_T - E_F) \left( E_T + \frac{\hbar\omega_c}{2} \right) D_0 - \frac{(E_T^2 - E_F^2)}{2} \frac{D_0}{2} = \\ &= (E_T - E_F) \left( E_T + \frac{\hbar\omega_c}{2} - \frac{E_T - E_F}{2} \right) D_0 = \\ &= \frac{1}{4} (\hbar\omega_c - \epsilon) (E_T - E_F + \hbar\omega_c) D_0 = \\ &= \frac{1}{8} [\hbar\omega_c^2(B) - \epsilon^2] D_0 = \end{aligned}$$

← Risultato diverso

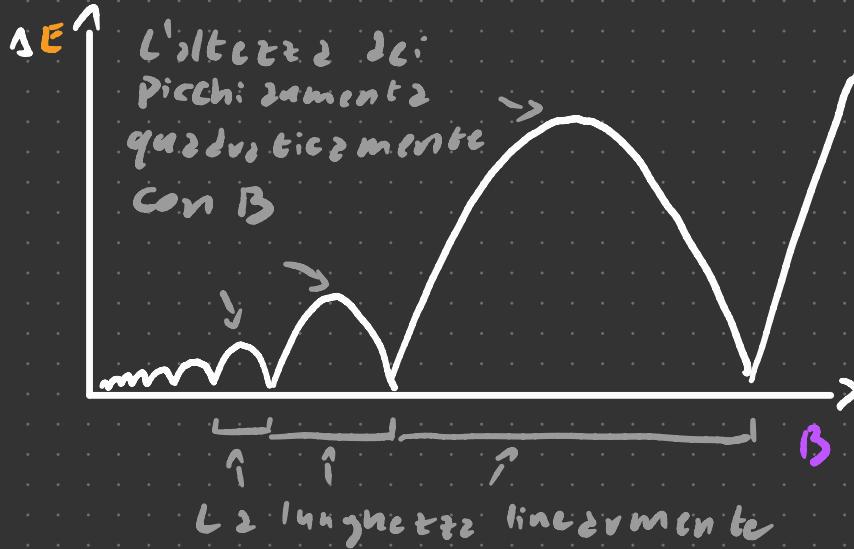
Con questa formula bisogna stare attenti perché  $\epsilon$  si riferisce a  $1/2 \delta$  più vicina, quindi cambia con discontinuità.

C'è da dire però che quando  $E$  cambi 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 "zone d'influenza" delle  $\delta$  di Dirac n-esime. E quando  $E_T = E_F = nh\omega_c$  è uguale a

$$\frac{\varepsilon}{2} = \left(n + \frac{1}{2}\right) h\omega_c - E_F = h\omega_c$$

quindi  $\Delta E(B)$  è tipo  
e n fissato, se uno  
vollesse vedere com'è il comportamento  
per ogni n all'inizio è così



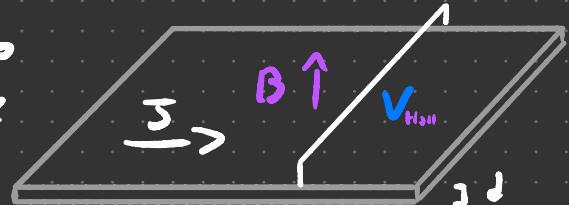
# EFFETTO HALL

Perturba l'effetto Hall classico

Normalmente in un conduttore isotropo

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

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



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

$$\vec{J} = \sigma \begin{vmatrix} E_x - \frac{B}{\rho_c} J_y \\ E_y + \frac{B}{\rho_c} J_x \end{vmatrix} \quad \begin{vmatrix} J_x + \frac{\sigma B}{\rho_c} J_y \\ J_y - \frac{\sigma B}{\rho_c} J_x \end{vmatrix} = \sigma \vec{E}$$

Polarizzazioni  
Velocità  
di  
elettroni.

matrice  
di resistività

$$\rightarrow \begin{vmatrix} \gamma \sigma & \frac{B}{\rho_c} \\ -\frac{B}{\rho_c} & \gamma \sigma \end{vmatrix} \begin{vmatrix} J_x \\ J_y \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} E_x \\ E_y \end{vmatrix}$$

Intensità di corrente

Se  $J_y = 0 \rightarrow \begin{cases} E_y = -\frac{B}{\rho_c} J_x & V_{Hall} = \frac{B}{\rho_c} \frac{I}{d} \\ E_x = J_x / \sigma \end{cases}$

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-bindingabbiamo

$$H = \sum_{n,m} E_0 |n,m\rangle \langle n,m| + \epsilon |n,m+1\rangle \langle n,m+1| + \epsilon |n,m\rangle \langle n,m+1| + \epsilon |n,m+1\rangle \langle n,m| + \epsilon |n,m+1\rangle \langle n+1,m| + \epsilon |n+1,m\rangle \langle n,m+1|$$

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

$$\text{e le energie sono } E(k) = E_0 + 2\epsilon \cos(k_x)$$

Aggiungere un campo magnetico equivale a mandare  $\vec{p} \rightarrow \vec{p} - e\vec{A}/c$ . L'hamiltoniano dunque soprattutto 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.

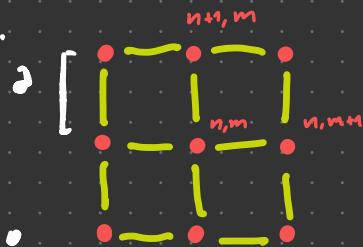
Il generatore infinitesimo delle traslazioni è  $d\vec{x} \cdot \vec{\nabla}$ .

Se ci mettiamo il campo magnetico

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

Quindi l'operatore di traslazione si trasforma così

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



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

$$|n, m+1\rangle \langle n, m| \xrightarrow{-i\alpha n} |n, m+1\rangle \langle n, m| e^{-i\alpha n}$$

$$|n+1, m\rangle \langle n, m| \xrightarrow{+i\alpha n} |n+1, m\rangle \langle n, m| \quad q = \frac{eB_0}{c\hbar}$$

Adesso mettiamo tutto assieme.

$$\begin{aligned} H = \sum_{nm} E_0 |\eta_m\rangle \langle \eta_m| + & t e^{-i\alpha n} |\eta_{m+1}\rangle \langle \eta_m| + \\ & + t e^{+i\alpha n} |\eta_m\rangle \langle \eta_{m+1}| + t |\eta_{m+1}\rangle \langle \eta_m| + \\ & + t |\eta_m\rangle \langle \eta_{m+1}| \end{aligned}$$

Adesso mettiamo la zero dell'energia in Es.

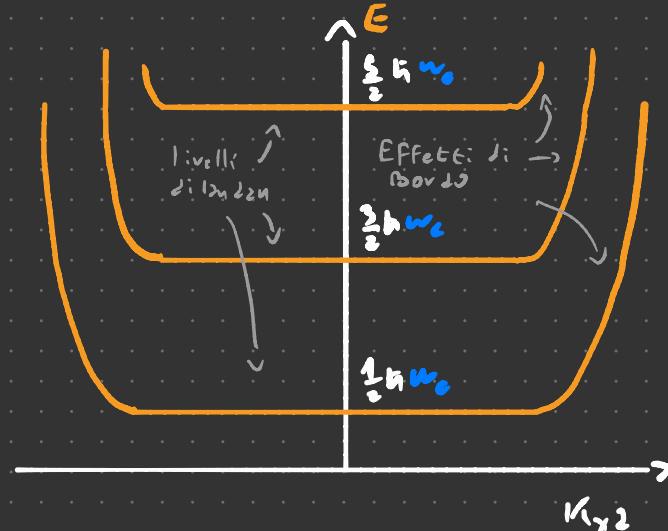
$$|\mathbf{k}_y, m\rangle = \sqrt{N_y} \sum_n e^{i k_y x_n} |n, m\rangle$$

$$\langle \mathbf{k}_y, m | H | \mathbf{k}_y, m \rangle = 2t \cos(k_x a - na) \quad \text{ho saltato i conti}$$

$$c_n = 2 \cos(k_x a - na)$$

$$H = t \left| \begin{array}{ccccc} c_1 & 1 & 0 & 0 & - \\ 1 & c_2 & 1 & 0 & - \\ 0 & 1 & c_3 & 1 & - \\ 0 & 0 & 1 & \ddots & \ddots \end{array} \right|$$

Diagonali:  $c_1, c_2, c_3, \dots$



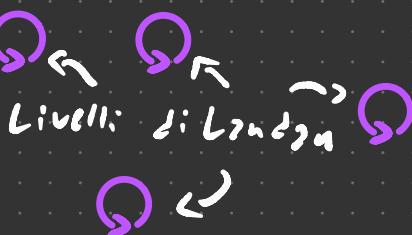
I livelli di Landau rappresentano gli stati degli elettroni all'interno del materiale bidimensionale e sono stati studiati all'inizio del capitolo sul magnetismo.

## Materiale

I livelli di Landau hanno energie oscillanti a una frequenza  $\omega_c$

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

Effetti:  
di Bande



Questo spiega come nei gli effetti di bordo hanno un'energia maggiore. Per avere una discussione più formale le occorre vedere che fanno tutti gli Autostati dell'Ham.

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

$$R_{\text{Hall}} = \frac{B}{I_{\text{cd}}} = \frac{BS}{eNe} = \frac{I}{eNe}$$

In questo caso però possiamo scrivere  $N$  in funzione di  $B$  perché sappiamo che le bande sono occupate e quanti elettroni ci stanno in un band. Pz prima si ha che la degenerazione è  $\frac{eBS}{ch}$ , quindi  $N = \frac{eBSV}{ch}$

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

# Proprietà ottiche di Semiconduttori e Isolenti

$$H = \frac{1}{2m} \left[ \vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{x}, t) \right]^2 + V(r) =$$

$$= H_0 + \underbrace{\frac{e}{mc} \vec{p} \cdot \vec{A}}_{\text{perturbazione piccola}} + \underbrace{\frac{e^2}{2mc^2} A^2}_{\text{perturbazione piccola}}$$

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

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

Le Regole d'oro di Fermi dice che se si ha un Hamiltoniano che abbia questa forma, quei

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

Le probabilità per unità di tempo che una particella dalla stato i a uno j è

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

Nel nostro caso se  $E_j > E_i$ :  $\frac{j}{i} \xrightarrow{\sim} \uparrow\downarrow$   
 l'equazione risulta

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

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

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 transizione a  $w$  fisso

$$W(\vec{n}, w) = \sum_{ij} P_{i \rightarrow j} = \sum_{ij} |V_{ij}|^2 e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} \hat{p} \cdot \hat{e} |ij\rangle$$

$$= \frac{4\pi}{h} \left( \frac{eA_0}{mc} \right)^2 \sum_{ij} |V_{ij}|^2 [\bar{n}(E_i) - \bar{n}(E_j)] \delta(E_j - E_i - \hbar\omega)$$

$\uparrow \quad \uparrow$   
Fermi-Dirac

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

$$\frac{\hbar\omega}{V} W(\vec{n}, w) = \vec{E} \cdot \vec{J} = \sigma_1 \left| \frac{\vec{E}}{2} \right|^2 \quad \text{Per la dissipazione d'energia}$$

contro solo la parte reale di  $\sigma$

$$\sigma \nabla \cdot \vec{E} = \nabla \cdot \vec{J} = \frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{1}{2} \nabla \cdot \vec{P} = -i\omega \chi \nabla \cdot \vec{E}$$

$$\chi = \frac{i\kappa}{w}$$

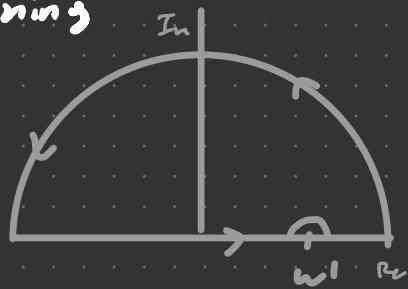
A me tutti gli discorsi non tornano perché in teoria bisognerebbe essere all'equilibrio termico dinamico, ma se poi si va a vedere con le emissioni spontanee non avviene nessuna perdita di potenza.

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

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

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

$$\left\{ \begin{array}{l} \chi_1(w) = \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\chi_2(w')}{w' - w} dw' \\ \chi_2(w) = -\frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\chi_1(w')}{w' - w} dw' \end{array} \right.$$



### Dimostrazione

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

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

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

$$\chi_1 = \frac{8e^2}{Vm^2} \sum_{ij} |V_{ij}|^2 [\bar{n}(E_i) - \bar{n}(E_j)] P \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{S(E_j - E_i - \hbar\omega)}{w^2(w) - \omega} dw$$

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

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

Si può sfruttare la proprietà che

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

$$X = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{\delta}{V} \left( \frac{e^{-\frac{\hbar}{kT} E_i}}{\sum_j e^{-\frac{\hbar}{kT} E_j}} \right)^2 \sum_i |V_{ij}|^2 \frac{[\bar{n}(E_i) - \bar{n}(E_j)]}{E_j - E_i - \hbar\omega - i\eta}$$

Adesso concentriamoci solo su  $X_2$  che è comunque più facile:

A temperatura bassa la distribuzione  $\bar{n}$  diventa a gradino, quindi possiamo scrivere

$$\sum_{ij} [\bar{n}(E_i) - \bar{n}(E_j)] \rightarrow \sum_i^{\text{Pieni vuoti}} \sum_j$$

$$X_2 \rightarrow \frac{8\pi}{V} \left( \frac{e^{-\hbar\omega}}{m} \right)^2 \sum_{i,j}^{\text{Pieni vuoti}} |V_{ij}|^2 \delta(E_j - E_i - \hbar\omega)$$

$$V_{ij} = \langle n_i, \kappa_i | e^{-\vec{p} \cdot \hat{r}} | n_j, \kappa_j \rangle$$

$$\begin{aligned} \vec{p} \cdot \hat{r} | n_i, \kappa_i \rangle &= -i\hbar \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{x}} u_n(\vec{x}) = \\ &= -i\hbar e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{x}} (\hat{\chi}_i \cdot \hat{e} + \delta_{ik}) u_n(\vec{x}) \end{aligned}$$

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

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

Se lavoriamo con frequenze di luce che vanno fino all'ultravioletto si ha che  $|K_i| < K_j$ ; quindi possiamo impostare  $K_i - K_j = 0$

Questo restinge di molto le transizioni effettibili.

$$\sum_{n=0}^{\text{piani vuoti}} \sum_{n'=v}^{\infty} \int d\vec{r}_i$$

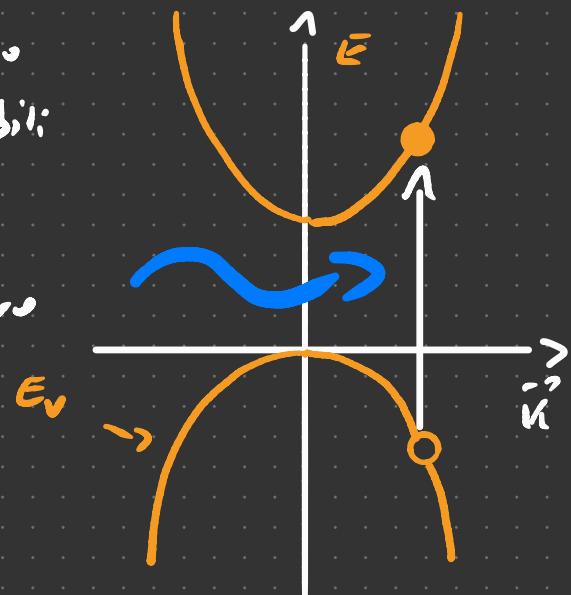
dove  $v$  indica il numero dell'ultima zona di valenza

$$V_{ij} \rightarrow V_{n,n'}(\vec{r})$$

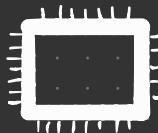
$$\chi_2 = \frac{e\hbar}{v} \left( \frac{e\hbar}{m} \right)^2 \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{n'=v}^{\infty} \int d\vec{r}_i [V_{n,n'}(\vec{r})]^2 S [E_n(\vec{r}) - E_{n'}(\vec{r}_i) - \hbar\omega] d\vec{r}_i$$

Le due sommatorie di solito finiscono per considerare solo le bandi di valenza e le prime di conduzione. Inoltre visto che  $\vec{r}$  è piccolo il termine  $\langle i | e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}} \hat{p} \cdot \hat{e} | j \rangle \rightarrow \langle i | \hat{p} \cdot \hat{e} | j \rangle$

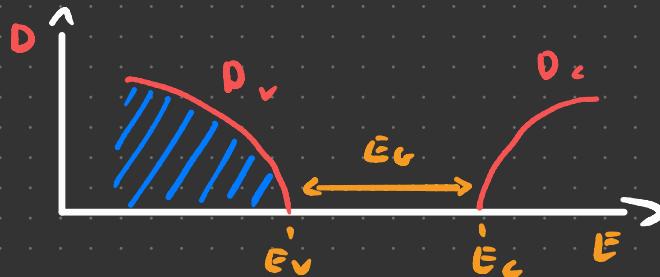
$$V_{n,n'}(\vec{r}) = \langle n, \vec{r} | \hat{p} \cdot \hat{e} | n', \vec{r} \rangle$$



# Semi Conduttori



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



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  $E_V$  e  $E_C$ . I semiconduttori sono detti **Intrinseci** se non presentano impurità, altrimenti sono detti **Estrinseci**.

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

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

Scriviamo gli autovalori  $\psi$  di questi hamiltoniani così  $\psi = \sum_{nK} A_{nK}(K) |n, K\rangle \rightarrow H |\psi\rangle = E |\psi\rangle \rightarrow$

$$\rightarrow \sum_{nK} [E_n(K) - E] A_{nK}(K) |n, K\rangle = \sum_{nK} V_1(K) A_{nK}(K) |n, K\rangle$$

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

Risolvendo sto problema egli autore troverà come cambiano le energie, ma per vedere più o meno che succede ci toccherà fare delle approssimazioni.

Consideriamo solo 12 bande di conduzione e diciamo che  $E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + E_c$ . Quindi:

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

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

Se definiamo  $F(r) = \sqrt{\pi} \sum_k A(k) e^{ik \cdot r}$  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 addosso.

$\frac{V_I \approx -\frac{e^2}{Er}}{E_c - \frac{---}{E_I} - \frac{---}{E_U}}$  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 le bande di conduzione. Se invece l'impurità ha un'elettrone in meno degli

Atomi che fanno il reticolato cristallino basta fare lo stesso ragionamento in termini delle lucine. Quindi si va a creare un livello energetico vuoto vicino alle bande di valenza.

Aggiungendo impurità siamo in grado di manipolare il potenziale chimico.

Per vedere quanto conduce un semiconduttore ci interesserebbe vedere quanti elettroni ha in banda di conduzione, o quante buche ha in banda di valenza. Primo facciamo questo conto per un semiconduttore senza impurità. Il num. di elettroni in banda di cond.

$$N_e(T) = \int_{E_c}^{+\infty} D_e(E) \bar{n}(E) dE \cdot \int_{E_c}^{+\infty} \frac{D_e(E)}{1 + e^{\frac{E-E_F}{kT}}} dE$$

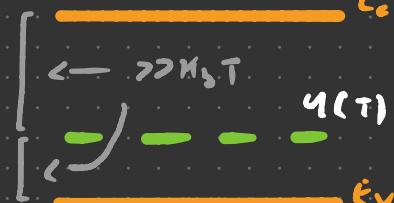
Alllo stesso il numero di buche è uguale a

$$B_h(T) = \int_{-\infty}^{E_F} \frac{D_h(E)}{1 + e^{\frac{E-E_F}{kT}}} dE$$

Attento al segno dell'esponente!

Visto che il numero totale di elettroni è uguale

$N_e(T) = B_h(T)$  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-Direzione alla Boltzmann



$$N_o(T) \geq \int_{E_c}^{+\infty} D_o(E) e^{-\frac{E-U}{k_B T}} dE =$$

$$= e^{\frac{U-E}{k_B T}} \underbrace{\int_{E_c}^{+\infty} D_o(E) e^{-\frac{E-E_c}{k_B T}} dE}_{= N_o(T)} = e^{-\frac{E_c-U}{k_B T}} N_o(T)$$

Alla stessa modo  $N_v(T) = e^{\frac{U-E}{k_B T}} N_v(T)$

Il sistema è quindi analogo a quelli di un sistema a due livelli con degenerazione  $N_o$  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 mettere lui vicino ( $\uparrow$  e  $\downarrow$ ) finiscono per respingersi.

Per questo motivo non posso usare la Fermi-Direc-

$$P(E_I) = e^{-\beta E_I} [e^{-\beta E_2^0} + e^{-\beta E_2^+} + e^{-\beta E_2^-}]^{-1} \xrightarrow{\text{Normaliz.}}$$

$$= \frac{1}{e^{\frac{E_2-U}{k_B T}} + 2}$$

Questo è un semiconduttore  $\Rightarrow$   
di tipo n perché gli elettroni  
che sono negativi. Quelli che dona  
buche si chiamano di tipo p

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

$$\hat{1} = \text{Probabilità di trovare un elettrone} = P(E_I)$$

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 a 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.

$$N_e(T) = B_0(T) + N_d [1 - 2\bar{n}(E_I, T)] \quad \text{ed}$$

Quale frazione  
di elettroni non  
sono attorno alle  
impurità?

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)

Adezzo ci basta scrivere esplicitamente  $N_e B_0$

$$e^{-\frac{E_a - u}{k_b T}} N_e(T) = e^{\frac{E_v - u}{k_b T}} N_v(T) + N_d \frac{e^{\frac{E_I - u}{k_b T}}}{e^{\frac{E_I - u}{k_b T}} + 2}$$

Ricordiamoci che noi vogliamo sapere quanto vale  $N_e(T)$  quindi ci toccherà calcolarci  $x \equiv e^{\frac{E_I - u}{k_b T}}$  risolvendo l'equazione di sopra.

Questa è un'equazione di terzo grado rispetto a  $x \equiv e^{\frac{E_I - u}{k_b T}}$  e nessuno ha la minima voglia di vedere su internet come si risolvano le eq. di III grado, quindi approssimiamo!

Considereremo 3 regioni di temperatura

$1 \quad K_b T \ll E_I$ (Regione di ghiaccamento)	$2 \quad K_b T \approx E_I$ (Regione di saturazione)	$3 \quad E_I \ll K_b T \ll E_g$ (Regione intrinseca)
---	--	--

Cominciamo con la regione di ghiaccamento.

In questo caso il potenziale chimico è compreso tra  $E_d$  e  $E_a$  (vedi immagine delle pagine prime).

$B_0(T) \approx 0$  perché è  $e^{\frac{E_v - u}{K_b T}} \rightarrow 0$

$$2\bar{n} \rightarrow \frac{1}{2} e^{\frac{E_I - u}{K_b T}}$$

Mettendo tutto insieme esce fuori questo

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

$e^{B_0} = \sqrt{\frac{N_d}{2N_c}} e^{\frac{E_I + E_C}{2k_B T}}$  rimettendo  $e^{B_0}$  nell'espressione di  $N_o$  esce fuori questo.

$$N_o(T_{piccola}) = \sqrt{\frac{N_d N_c(T)}{2}} e^{\frac{E_I - E_C}{2k_B T}}$$

Adezzo prossimo 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 nelle bande di conduzione o in un impurità è dello stesso ordine di grandezza, ma il numero di stati in bande di conduzione è enormemente più grande, quindi tutti gli elettroni si vanno a mettere là

$$N_o(T_{saturazione}) \approx N_d$$

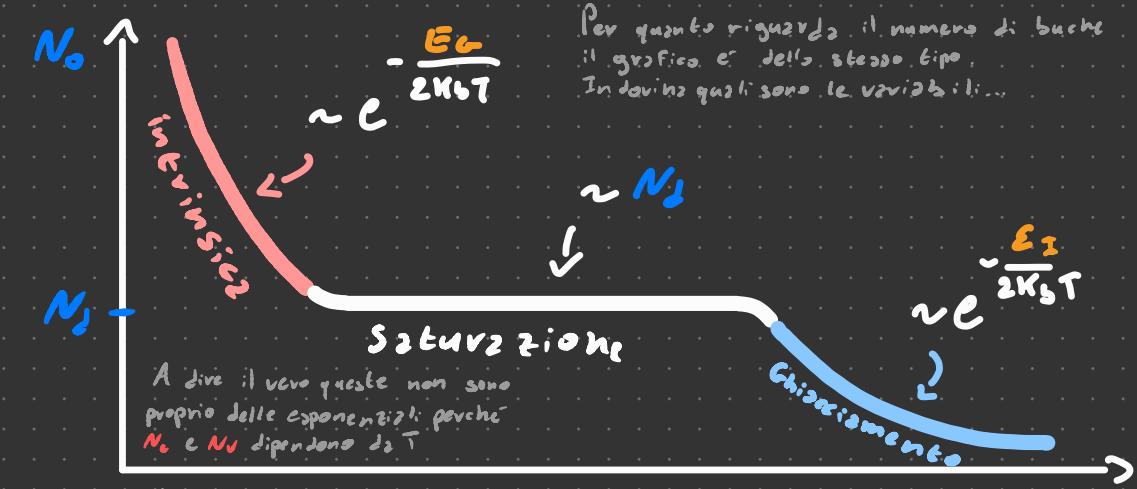
Per quanto riguarda la regione intrinseca ( $E_I < k_B T < E_C$ ) abbiamo che gli elettroni vicino a saltare tra le due bande. Viste che gli orbitali del drogante sono pochi rispetto al numero di orbitali liberi dove gli elettroni possono andare a infilarsi possiamo dire che  $N_o \ll N_d, B_0$ . Quindi

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

$$e^{-\beta \mu} = \sqrt{\frac{N_c}{N_v}} e^{-\frac{(E_v + E_c)}{2k_B T}}$$

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

A questo punto disegniamo il grafico.



A dire il vero queste non sono proprio delle esponenziali perché  $N_c$  e  $N_v$  dipendono da  $T$

D'altro  
parte qua  
ci sia  $1/E_d$

Attento che qua ci  
sta  $1/k_B T$ , non  $T$

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

# Trasporti nei Semiconduttori

Per qualche strana ragione ci tocca usare la versione scemz 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

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

Corrente dovuta alle cariche portatrici di massa  $m_e$  proporzionale alla densità di elettroni in banda di conduzione

Stessa cosa, ma fatto con le buche

Se ci mettiamo un campo elettrico allora

$$\vec{J}_e = \frac{N e^2 T_e}{m_e} \vec{E} + e D_e \vec{\nabla} N = N e v_e \vec{E} + e D_e \vec{\nabla} N$$

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

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

$$N(\vec{x}, T) = e^{-\frac{E(\vec{x}) - U}{kT}} N_e(T) \quad E_c(\vec{x}) = E_c(0) + e \times (\vec{E})$$

Vero solo se  $J=0$

$$\vec{J}_N = -\frac{\nabla E_e(\vec{x})}{K_b T} e^{-\frac{E_e(\vec{x}) - \mu}{K_b T}} N_e(T) = \frac{\vec{E} e N(\vec{x}, T)}{K_b T}$$

Visto che  $\vec{J} = 0$   $N_e e \vec{E} + e D_e \vec{\nabla} N = 0$

$$N_e e \vec{E} = \frac{e D_e \vec{\nabla} N}{K_b T} \rightarrow D_e = \frac{K_b T u_e}{e}$$

Questa relazione è valida sempre, noi ce la siamo ricavata all'equilibrio perché è più facile, allo stesso modo  $e D_B = u_B K_b T$ .

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

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

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:

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

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

$$R - G \quad \left\{ \begin{array}{l} 2N \text{ fissato dipende linearmente in } B \\ 1 \quad 2B \text{ fissato dipende linearmente in } N \end{array} \right.$$

Riduzione percentuale di volume e di tempo del numero di elettroni liberi e buche e inoltre all'equilibrio termico  $G - R = F_2$  zero

$$R - G = C_1 NB + C_2 N + C_3 B - C_4 N_B - C_5 N_o - C_6 B_o$$

L'equazione dev'essere simmetrica se mandiamo  $N \rightarrow B$  e  $N_o \rightarrow B_o$ . Quindi esce un'equazione così

$$R - G = A(NB - N_o B_o) + C(N + B - N_o - B_o)$$

Nel libro il termine con i  $C$  non ci sta (Perché?)

$$R - G = A(NB - N_o B_o) \leftarrow \begin{matrix} \text{Ricordati che } B, B_o, N, N_o \\ \text{dipendono da } \vec{x} \text{ et} \end{matrix}$$

## Trasporto in Semiconduttori Dopati:

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

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



## STEFANO RODDARO

Registri a.a. 2019/2020

### DATI REGISTRO

<b>insegnamento</b>	FISICA DELLO STATO SOLIDO (cod. 204BB)
<b>corso di studi</b>	WFI-LM - FISICA <i>Condiviso con altri corsi di laurea</i> <a href="#">dettaglio</a>
<b>periodo</b>	Primo semestre
<b>responsabile</b>	STEFANO RODDARO
<b>docenti</b>	STEFANO RODDARO , ALESSANDRO PITANTI
<b>totale ore</b>	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)
- 1 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)
- 1 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)
- 1 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)
- 1 8. Mar 08/10/2019 10:00-12:00 (2:0 h) lezione: Definition of nth 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)
- 1 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 dot 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: 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:  $d\mu/dT$ , cV. 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)

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