

# ELETTRONICA DELLO STATO SOLIDO

del PROF. DANIELE TELMINI - Pietro Giannuccaro III ANNO

INTRODUZIONE AL PROBLEMA	1
STRUTTURA DEI MATERIALI, CRYSTALLOGRAFIA	1

MECCANICA QUANTISTICA	5
-----------------------	---

INTRODUZIONE: LA RADIATIONE DEL CORPO NERO	5
--	---

UN'ULTERIORE CONFIRMA: L'EFFETTO FOTOELETTRICO	14
--	----

INTERPRETAZIONE Ondulatoria delle particelle	17
--	----

EQUAZIONE DI SCHRÖDINGER	20
--------------------------	----

MODELLO DI BORN PER L'EQ. DI SCHRÖDINGER	22
--	----

FLUSSO QUANTISTICO	25
--------------------	----

EQ. DI SCHRÖDINGER con CAMPI STAZIONARI	27
---	----

FUNZIONI D'ONDA	29
-----------------	----

PARADOSSO EPR, ENTANGLEMENT	31
-----------------------------	----

RISOLUZIONE DI PROBLEMI QUANTISTICI	33
-------------------------------------	----

PROBLEMA DELLA PARTICELLA LIBERA	33
----------------------------------	----

VELOCITÀ DELLA PARTICELLA, DI FASE, DI GRUPPO	37
---	----

GRADINO DI POTENZIALE, NECESSITÀ DI $\Psi(x,e)$	39
---	----

EFFETTO TUNNELING	44
-------------------	----

ONDA INCIDENTE, TRASMESSA, RIFLESSA	45
-------------------------------------	----

BARRIERA DI POTENZIALE	47
------------------------	----

APPROXIMAZIONE WKB	50
--------------------	----

BARRIERA TRIANGOLARE	50
----------------------	----

BARRIERA DI POTENZIALE e RISONANZA	51
------------------------------------	----

CASO GENERALE NON STAZIONARIO	53
-------------------------------	----

BUCHE DI POTENZIALE	57
---------------------	----

CASO $V_0$ INFINITO	57
---------------------	----

CASO $V_0$ FINITO	62
-------------------	----

OSCILLATORE ARMORICO QUANTISTICO	65
----------------------------------	----

POTENZIALI BIDIMENSIONALI: QUANTUM WELL, WIRE, DOT	69
--	----

RIEPILOGO DEI POTENZIALI e EQ. DI SCHRÖDINGER	72
---	----

COPPIA DI BUCHE DI POTENZIALE	75
-------------------------------	----

TEORIA DELLE BANDE	80
--------------------	----

RETIColo DI BUCHE DI POTENZIALE	80
---------------------------------	----

TEOREMA DI BLOCH	81
------------------	----

MODELLO DI KRONIG-PENNEY	82
--------------------------	----

MODELLO DI TIGHT BINDING	88
--------------------------	----

MASSA EFFICACE	91
----------------	----

MODELLO DI WEAK BINDING	92
-------------------------	----

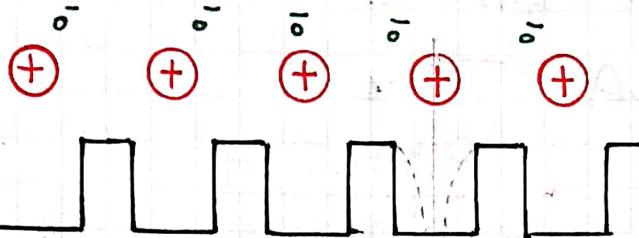
il TRASPORTO DEGLI ELETTRONI	95
LA TEORIA SEMICLASSICA	95
VELOCITA' DI GRUPPO e APPROXIMAZIONE PARABOLICA	97
BANDA DI VALENZA e BANDA DI CONDUZIONE	98
CONTRIBUTO DI CORREZIONE	99
ELETTRONI e LACUNE	102
SCATTERING e il PARADOSSO DELLE OSCILLAZIONI DI BLOCH	103
MODELLO DI DOWDE	105
RETICOLO RECIPROCO	107
STRUTTURA A BANDE (in 2D e 3D)	110
BANDE DI CONDUZIONE e DI VALENZA	
SUPERFICI DI FERMI (ISOENERGETICHE)	
DENSITA' DI STATI	117
DENSITA' DI ELETTRONI e LACUNE	118
ISOTROPIE e ANISOTROPIE; VALORI ELETTROPICHE	122
MASSA DOS	123
MASSA DI CONDUZIONE	125
DISTRIBUZIONE DI FERMI - DIRAC	126
MOMENTI ANGOLARI e MECCANICA QUANTISTICA	126
BOSONI e FERMIONI	128
LIVELLO DI FERMI	129
EFFETTO TERMOIONICO e CORRENTE TERMOIONICA	132
LEGGE DI RICHARDSON	133
CALCOLO DELLA CONCENTRAZIONE DI ELETTRONI e LACUNE	134
SEMICONDUTTORI INTRINSECI	136
CONCENTRAZIONI e LEGGE DI AZIOTE DI MASSA	138
SEMICONDUTTORI ESTRINSECI, ie DROGGAGGIO	139
MODELLO IDROGEOIDE, ENERGIA DI LEGAME	140
LIVELLO DI FERMI e LIVELLO INTRINSECO	142
CONCENTRAZIONE e TEMPERATURA	143
FREEZE-OUT, ZONA ESTRINSECA e INTRINSECA	
PRINCIPIO DI NEUTRALITA'	
TRASPORTO PER DERIVA/DRIFT (CAMPI ELETTRICI)	148
DIFETTI e LEGGE DI MATHIESSEN	149
EFFETTO HALL	153
MOBILITA' e CAMPO ELETTRICO	155
TRAESORIO PER DIFFUSIONE (GRADIENTE DI CONCENTRAZIONE)	157
I LEGGE DI FICK e LEGGE DI FINESTEIN	158
II LEGGE DI FICK	159
PORTATORI MINORITARI e INIEZIONE	161
EQUAZIONI DI CONTINUITA'	162
RICOMBINAZIONE DEI MINORITARI	163
EQUAZIONE DEI MINORITARI	164
IRRAGGIAMENTO DI UN SEMI CONDUTTORE e LUNGHEZZA DI DIFFUSIONE	165

## INTRODUZIONE AL PROBLEMA

L'elettronica dello stato solido si occupa di comprendere il TRASPORTO DELLE CARICHE NEI SOLIDI.

I metalli sono fatti di ATOMI, posizionati secondo una REGOLARITÀ GEOMETRICA, la cui tendenza è quella di cedere elettroni ionizzandosi positivamente.

→ complessivamente si manifestano FORZE ELETROSTATICHE con IONI POSITIVI FISSI e ELETTRONI che ORBITANO.



modellizzando ciascuno come come una buca rettangolare di potenziale possiamo dire che gli elettroni tenderanno a:

- I) essere INTRAPPOLATI nell'ATOMO
- II) ESPLODARE IL METALLO.

→ COME SI MUOVE UN ELETTRONE IN QUESTE BUCHE?

## STRUTTURA DEI MATERIALI - CRYSTALLOGRAFIA

Prima di partire con un modello fisico, cerchiamo di capire la struttura in cui gli elettroni si muovono:

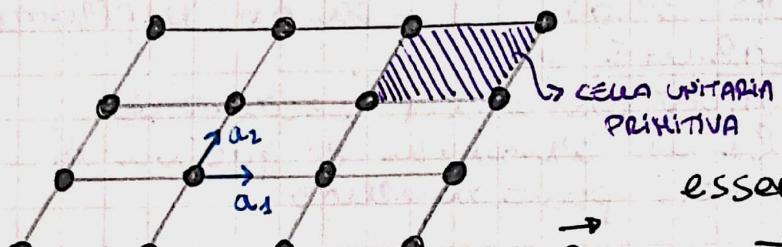
A) STRUTTURA AMORFA: atomi disposti 'a caso', cercano di rispettare la propria cardinalità. Celle di forma casuale.

B) STRUTTURA CRYSTALLINA: regolare, formata da CELLE PRIMITIVE (preferiti dall'elettronica)

C) STRUTTURA POLYCRYSTALLINA: più cristalli uniti in modo disordinato detti GRANI, con ORIENTAMENTO PLANARE DIFFERENTE.

Due grani sono collegati da BORDI DI GRANO che introducono molti difetti in elettronica.

# DESCRIZIONE MATEMATICA DEI CRYSTALLI



Possiamo descrivere VETTORI PRIMITIVI da cui poter ricostruire tutto il reticolo. La posizione di un PODO può essere descritta da un vettore  $\vec{\beta}$ :

$$\vec{\beta} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$$

con  $n_{1,2,3} \in \mathbb{Z}$

la CELLA

UNITARIA

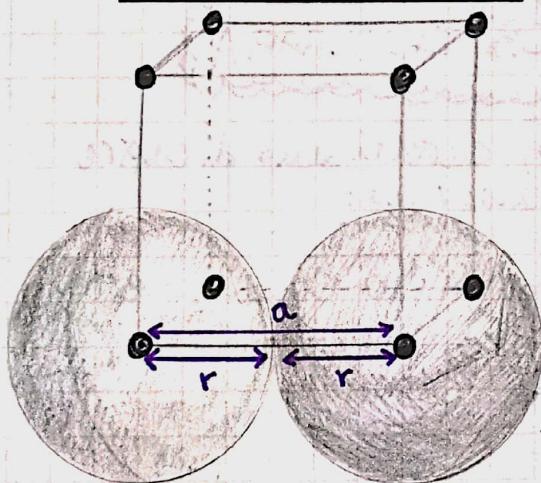
Se traslata permette di occupare tutto lo spazio

PRIMITIVA

di dimensione minima.

## CRYSTALLOGRAPHY

- ) CUBICO SEMPLICE: possiamo definire le PACKING FACTOR



$$PF = \frac{\text{VOLUME OCCUPATO}}{\text{VOLUME TOTALE}}$$

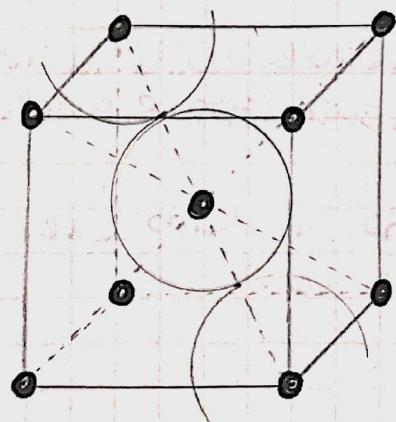
dagli atomi  
 $M \cdot \left(\frac{4}{3} \pi r^3\right)$

$$= \frac{\frac{4}{3} \pi r^3}{a^3} = \frac{\pi}{6} (52\%)$$

$a = 2r$

$r$  con i primi vicini

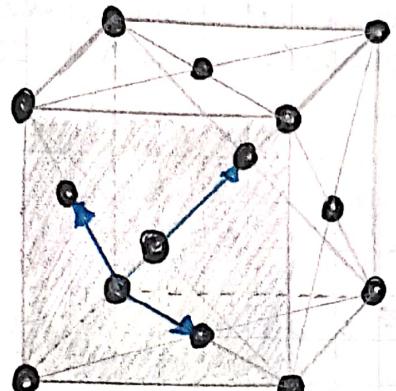
- ) CUBICO A CORPO CENTRATO (BCC):



$$2r = \sqrt{3}a \quad \Rightarrow \quad PF = \frac{\pi \sqrt{3}}{8} = 68\%$$

$$M = 8 \cdot \frac{1}{8} + 1$$

## o) CUBICO A FACCE CENTRATE (FCC):



$$r = a\sqrt{2}$$

$$M = 8 \cdot \frac{1}{8} + 6 \cdot \frac{1}{2} = 4$$

$$PF = 74\%$$

## ALTRI RETICOLI DI BRAVAIS

A) CUBICO (3 tipi) ( $\alpha, \beta, \gamma = 90^\circ; a_1 = a_2 = a_3$ )



B) TETRAZONALE (2 tipi) ( $\alpha, \beta, \gamma = 90^\circ; a_1 = a_2 \neq a_3$ )



C) OCTOBOMBICO (4 tipi) ( $\alpha, \beta, \gamma = 90^\circ; a_1 \neq a_2 \neq a_3$ )

D) ESAGONALE (1 tipo)

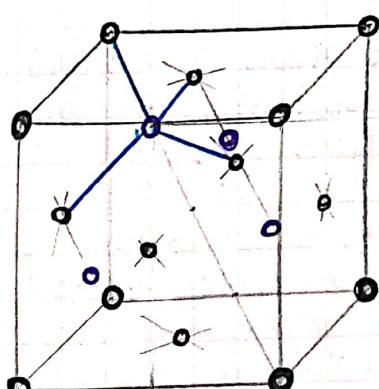
E) TRIGONALE (1 tipo)

F) TRICLINICO (1 tipo)

G) MONOCLINICO (1 tipo)

## il SILICIO

Una via struttura particolare che non rientra nei 14 reticolati di Bravais



si ottiene traslando lungo  $\frac{1}{4}$  della diagonale la FCC.

Molti atomi escono dalla cella originale, altri restano.

↳ Molti degli elementi del IV GRUPPO (Si, Ge) interessanti per l'elettronica hanno questa struttura

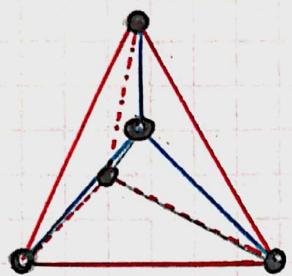
### COORDINAZIONE 4

ogni nodo ha 4 primi vicini.

con i primi nuclei si forma un TETRAEDRO (che troviamo ripetuto).

Ognuno degli elementi del **IV** gruppo si lega ad altri 4 atomi per ottenere i 4 elettroni necessari per completare l'ottetto, tramite ibridizzazione  $sp^3$  degli orbitali.

dove



$$\frac{a\sqrt{3}}{4} = 2r \Rightarrow PF = 34\%$$

$$M = 8$$

esempio: nel Silicio  $a = 543 \text{ \AA} = 5,43 \cdot 10^{-10} \text{ m}$

possiamo calcolare la DENSITÀ ATOMICA DEL silicio  $n_{AT}$

$$n_{AT} = \frac{8}{a^3} \left[ \frac{\text{atomi}}{\text{m}^3} \right] = \frac{8 \text{ at}}{(5,43 \cdot 10^{-8})^3 \text{ cm}^3} = 5 \cdot 10^{22} \frac{\text{atomi}}{\text{cm}^3}$$

oppure la DENSITÀ DI ELETTRONI DI VALENZA  $n_{e^-}$

$$n_{e^-} = 4 \cdot n_{AT} = 2 \cdot 10^{23} \text{ cm}^{-3}$$

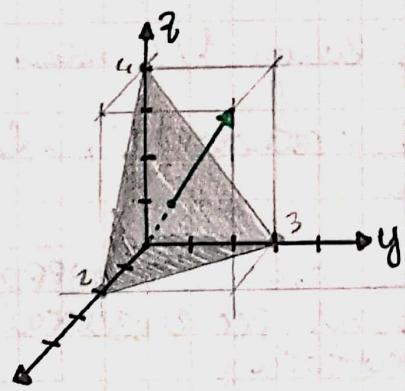
o ancora il RAGGIO ATOMICO del silicio  $r_{Si}$

$$r_{Si} = a \frac{\sqrt{3}}{4} = 1,2 \text{ \AA}$$

### Indici di Miller

All'interno di ciascuna cella/reticolo ci sono piani particolari che contengono gli atomi.

Tali piani possono essere descritti tramite gli indici di Miller:



x	y	z
2	3	4
$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{4}$

$\times (12) [w.c.f.]$

$\rightarrow [6 \ 4 \ 3]$

i piani lungo gli assi si indicano con  $\{100\}$

si possono anche descrivere vettori (ortogonali ai piani associati)

# MECCANICA QUANTISTICA

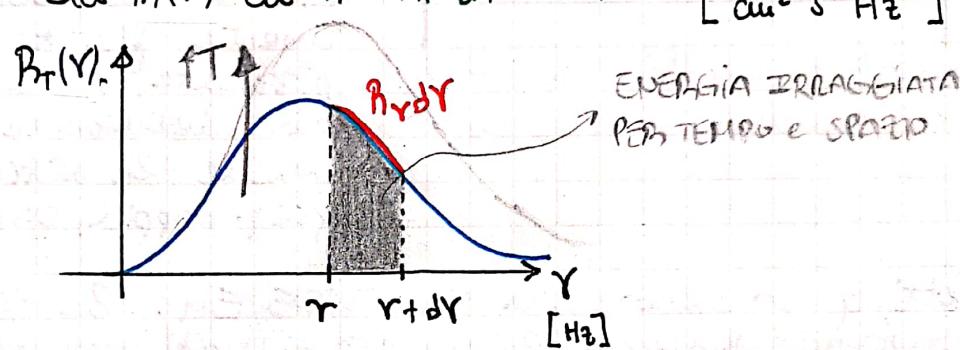
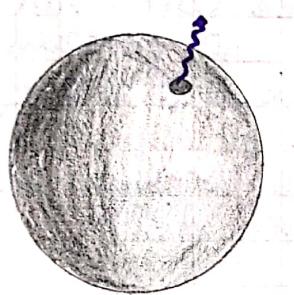
Fondamentale per comprendere le funzionamento microscopico delle particelle.

## INTRODUZIONE - LA RADIAZIONE DEL CORPO NERO

Si vuole studiare la radiazione emessa da un corpo, dovuta agli atomi che 'irraggiano' all'esterno parte della loro energia.

Viene quindi scelto un **CORPO NERO**, in quanto questo assorbe idealmente tutta la radiazione, e pertanto quella emessa è ideale (non ha interferenza delle onde associate al suo colore).

Sia  $R_T(\nu)$  la RADIANZA SPEGTRALE  $\left[ \frac{J}{cm^2 s Hz} \right]$



Siamo inoltre:

A) LEGGE DI STEFAN DELL'IRRAGGIAMENTO:

$$\int_0^\infty R_T(\nu) d\nu = \sigma T^4$$

B) LEGGE DI WIEN:  $\lambda_{MAX} \cdot T = 2,9 \cdot 10^{-3}$   $\frac{\text{metri}}{\text{K}}$  (aumentando T)  
(il colore va dal rosso al blu)  
(il p.t.o di max si sposta a dx in freq.)

Intendiamo dunque il **CORPO NERO** come un **CORPO CAVO** con un **ORIFIZIO**. Questo orifizio è un ottimo **CORPO NERO** perché la **RADIATORE** che vi incide rimbomba allo interno e difficilmente esce dallo stesso orifizio (**IDEALMENTE ASSORBE TUTTA LA RADIATORE**, ottimo nero).

La superficie della cava ha una temperatura costante e uniforme, i cui atomi agitandosi emettono radiazione elettromagnetica, definendo la **RADIANTZA SPEGTRALE**.

$R_T(\nu) d\nu$  rappresenta l'energia per unità di tempo e superficie.

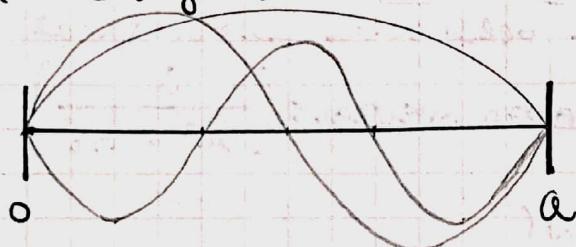
Siamo interessati alla RADIANZA (è l'emissione di energia per unità di area e di tempo) che è l'equivalente a studiare la DEPSITA' di ENERGIA della cavità, all'interno della quale ci sono onde EM, a tante frequenze diverse in varie direzioni.

↳ Ci CONCEPTEBIMMO SULLA DEPSITA' DI ENERGIA DELLA CAVITÀ PER POI STUDIARE QUELLA CHE ESCE DALL'ORIFIZIO (ad una certa T).

Semplifichiamo il problema:

### CASO 3D

POSSONO ESISTERE NELLA CAVITÀ SOLO BEN PRECISE FREQUENZE (che definiscono i MODI DI CAVITÀ)



il problema è molto simile allo studio delle corde vibranti. Queste, fissate agli estremi, se pizzicate, avranno una frequenza di oscillazione principale ma anche le altre armoniche a freq. doppia, tripla, etc...

Lo stesso accade con le Onde EM: la lunghezza della cavità vincola il numero di modi ammessi. Tutti gli altri modi che non rispettano i vincoli sono automaticamente esclusi.

Possiamo modellizzare un'ONDA EM viaggiante come

$$e^{j(kx - \omega t)} \quad (\text{lungo } x \text{ positivo})$$

con  $k = 2\pi/\lambda \rightarrow$  TERMINE SPAZIALE, NUMERO D'ONDA

$\omega = 2\pi\nu \rightarrow$  TERMINE TEMPORALE, FREQ. ANGOLARE

Tale onda parte da 0 e arriva in a, dove viene riflessa in direzione negativa

$$e^{j(-kx - \omega t)}$$

Da cui

$$\bar{E} = E_0 [e^{j(kx - \omega t)} + e^{j(-kx - \omega t)}]$$

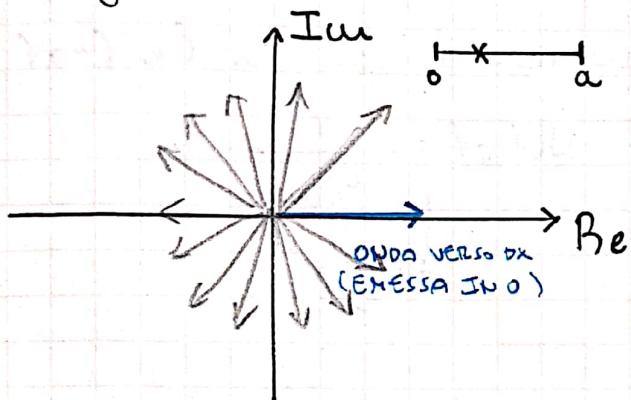
dove è corretto assumere che le due onde abbiano pari ampiezza per la simmetria della superficie emittente.

Si può creare quindi INTERFERENZA COSTRUTTIVA o DISTRUTTIVA (osservabile da un terminus coseno)

Sviluppando i termini infatti:

$$\bar{E} = \bar{E}_0 \left[ e^{j(kx - wt)} + e^{j(-kx - wt)} \right] = 2\bar{E}_0 e^{-jwt} \cos kx$$

Le due onde rappresentate nello spazio dei fasori:  
Le due onde rappresentate nello spazio dei fasori:



Questo accade per tutti i modi 'non ammessi' dalla CAVITÀ.  
Quelli ammessi invece vedono i propri fasori sommarsi, dando  
INTERFERENZA COSTRUTTIVA.

→ Ricapitolando i modi di cavità sono onde stazionarie nella cavità, e nel dettaglio, solo quelle che rispettano questa condizione di annullamento al contorno (imposte dalla lunghezza della cavità)

Se volessimo elencare tali modi CAVITÀ:

$$a = m \cdot \frac{\lambda}{2} \quad \text{con } m = 1, 2, 3, \dots$$

MODI DI CAVITÀ AMMESSI

ovvero quelli che ci fanno stare 1 ausa (metà lunghezza d'onda  $\lambda/2$ ), 2 ause, 3 ause e così via.

→ tornando al PROBLEMA della RADIANTA SPETTRALE  
l'asse  $\nu$  non è continuo, perché non tutte le  $\lambda$  sono ammesse!)

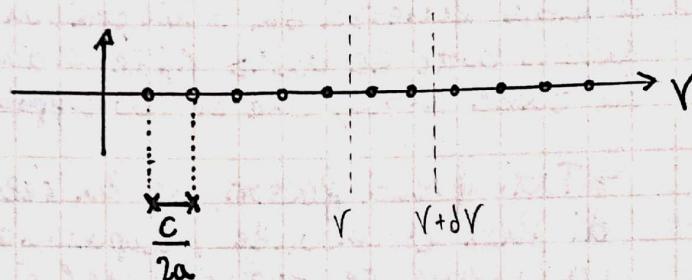
$$\nu = \frac{c}{\lambda} = \frac{c}{2a} \cdot m$$

FREQUENZE AMMESSE

Per definire la DENSITÀ DI ENERGIA, possiamo iniziare a cercare la DENSITÀ DI MODI (numero di modi tra  $\nu$  e  $\nu + d\nu$ )

↳ la RADIANZA SPECTRALE ci consente di arrivare alla RADIANZA, ma prima occorre calcolare quanto vale  $R_T(\nu) d\nu$  valutando il numero di modi nelle unità infinitesime di frequenza.

Calcoliamo  $N(\nu) d\nu$  avendo il numero di modi tra  $\nu$  e  $\nu + d\nu$

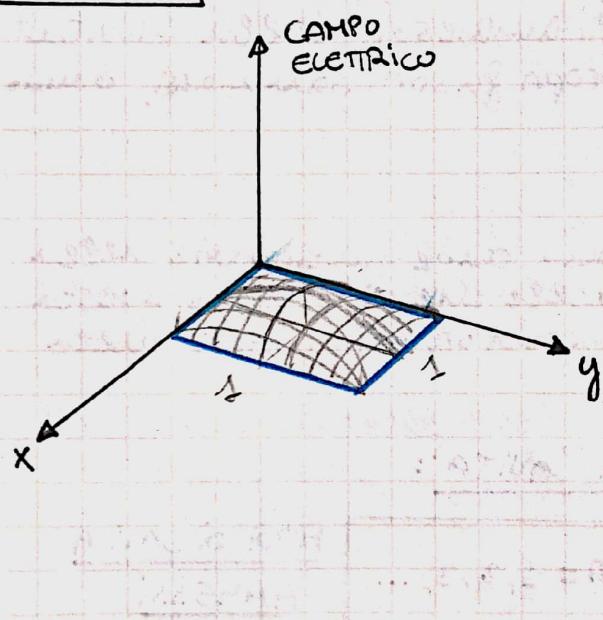


$$N(\nu) d\nu = \frac{d\nu}{c/2a} \cdot 2$$

$$= \frac{4a}{c} d\nu$$

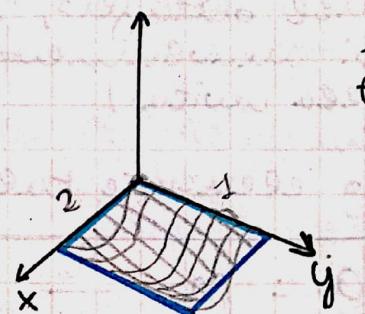
→ ogni modo è una radiazione EM che può essere polarizzata  
x o y  
(del campo elettrico)

### CASO 2D



qui le onde EM sono vincolate lungo tutto i bordi della superficie.

Naturalmente in 2D si possono presentare situazioni più complicate, ad esempio modi diversi su asse x o y



e così via con tutte le combinazioni

l'ONDA EM diventa

$$\mathbf{E}(x, y, t) = \mathbf{E}_0 \sin k_x x \sin k_y y \sin \omega t$$

dove i  $k_i$  devono rispettare i vincoli di lunghezza

$$a = m_x \frac{\lambda_x}{2} \quad k_x = \frac{2\pi}{\lambda_x} = \frac{\pi}{a} m_x$$

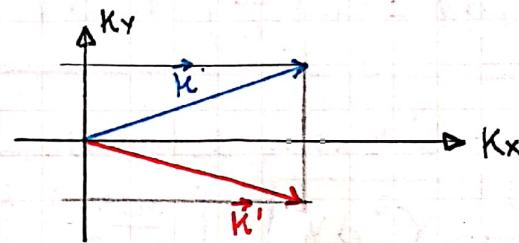


$$a = m_y \frac{\lambda_y}{2} \quad k_y = \frac{2\pi}{\lambda_y} = \frac{\pi}{a} m_y$$

ma che corrispondenza c'è tra  $\omega$  (da cui ricavare  $V = \frac{\omega}{2\pi}$ ) e  $k_x, k_y$  (ovvero  $\lambda$ )? Nel caso 1D la corrispondenza era ovvia. Ma qui quale  $\lambda$  dobbiamo prendere?

→ Svilupperemo l'eq. che descrive l'onda EM:

$$\begin{aligned}
 E(x, y, t) &= E_0 \sin(k_x x) \cdot \sin(k_y y) \cdot \sin(\omega t) \\
 &\stackrel{1}{=} \frac{E_0}{2j} \frac{e^{jk_x x} - e^{-jk_x x}}{2j} \cdot \frac{e^{jk_y y} - e^{-jk_y y}}{2j} \sin(\omega t) \\
 &\stackrel{2}{=} \frac{E_0}{-4} \left[ e^{j(k_x x + k_y y)} + e^{-j(k_x x + k_y y)} - e^{j(k_x x - k_y y)} - e^{-j(k_x x - k_y y)} \right] \sin(\omega t) \\
 &\stackrel{3}{=} -\frac{E_0}{2} \left[ \cos(k_x x + k_y y) - \cos(k_x x - k_y y) \right] \sin(\omega t) \\
 &\stackrel{4}{=} -\frac{E_0}{2} \left[ \cos(\vec{k} \cdot \vec{r}) - \cos(\vec{k}' \cdot \vec{r}) \right] \sin(\omega t)
 \end{aligned}$$



$\vec{k}$  e  $\vec{k}'$  hanno stesso modulo.

$$|\vec{k}| = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$$

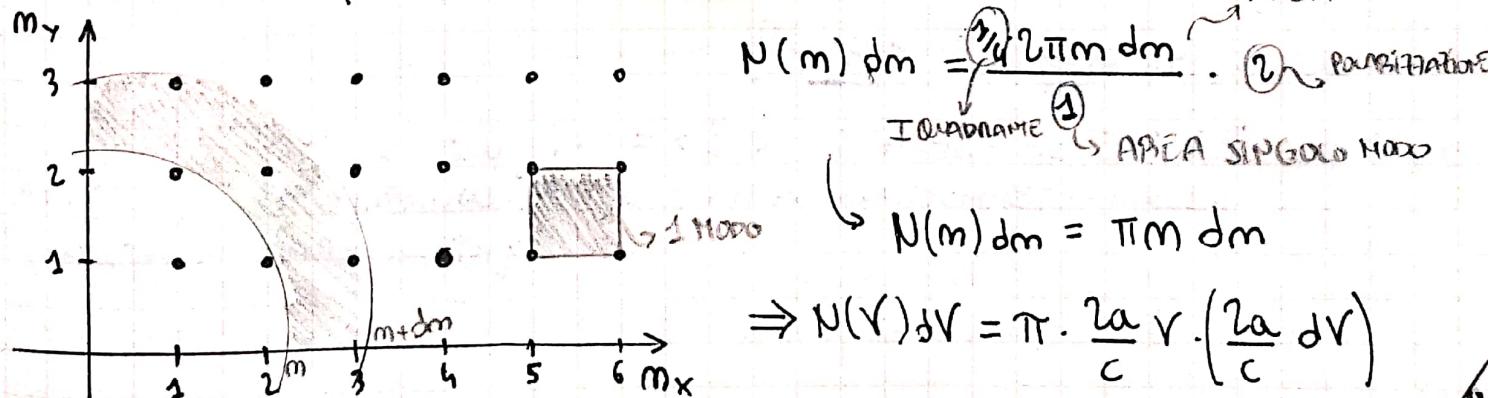
ogni coppia  $m_x, m_y$  ci dà un unico  $\lambda, k$  e quindi  $V = c/\lambda$  (unica frequenza associata)

$$|\vec{k}| = \sqrt{k_x^2 + k_y^2} = \frac{\pi}{a} \sqrt{m_x^2 + m_y^2} = \frac{\pi}{a} m \quad \text{con } m \text{ uno intero (necessariamente)}$$

$$\rightarrow V = \frac{c}{\lambda} = \frac{c}{2\pi} m = \frac{c}{2a} m \quad (\text{stesso risultato 1D!})$$

... e la DEPSITA' di modi?

Partiamo da quanti modi ci sono tra  $m$  e  $m+dm$

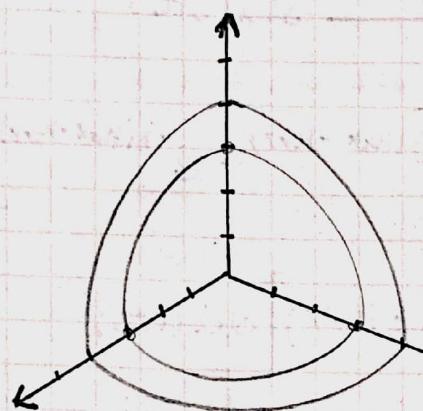


Ora la DENSITÀ DEI MODI tra  $V$  e  $V+dV$  diventa:

$$N(r)dr = \pi \left(\frac{2a}{c}\right)^2 V dr \quad (2D)$$

CASO 3D possiamo facilmente dire che

$$r = \frac{c}{2a} m \quad \text{con } m = \sqrt{m_x^2 + m_y^2 + m_z^2} \Rightarrow V \text{ discreta}$$



Guscio sférico

$$N(m)dm = 2 \cdot \frac{1}{8} \cdot \frac{4\pi m^2 dm}{1} = \pi m^2 dm$$

da cui si ottiene

$$N(r)dr = \pi \left(\frac{2a}{c}\right)^2 r^2 \frac{2a}{c} dr$$

e in definitiva

$$N(r)dr = \pi \left(\frac{2a}{c}\right)^3 r^2 dr$$

NUMERO DI MODI  
in 3D

se vogliamo la densità di modi scompare  $a^3$

$$N(r)dr = \frac{8\pi}{c^3} \cdot r^2 dr \quad \left[ \frac{\text{numero di modi}}{\text{m}^3 \text{ Hz}} \right]$$

tra  $V$  e  $V+dV$

→ Vogliamo ora ottenere la DENSITÀ DI ENERGIA per unità di volume e di Hertz (antiche! ie numero di modi)

$\rho_T(V)$ : DENSITÀ DI ENERGIA

$$\hookrightarrow \rho_T(V)dr = N(V)dr \cdot \langle E \rangle$$

NUMERO DI MODI  
PER UNITÀ DI  
VOLUME

ENERGIA MEDIA  
DEL MODO

COME RICAVARE  $\langle E \rangle$ ?

per RAYLEIGH - JEANS  $\langle E \rangle = \mu T$   
secondo TERMODINAMICA CLASSICA

per il PRINCIPIO DI  
EQUIPARTEZIONE DELL'ENERGIA  
( $\frac{1}{2} \mu T$  per GRADO DI LIBERTÀ)

Secondo il calcolo:

$$\langle E \rangle = \frac{\int_0^{\infty} \frac{1}{2} uv^2 e^{-\frac{uv^2}{2kT}} dv}{\int_0^{\infty} e^{-\frac{uv^2}{2kT}} dv}$$

energia partecipa  
per 1 grado di libertà.

$\Rightarrow$  probabilità esp. ad es.

$$= kT \frac{\int x^2 e^{-x^2} dx}{\int e^{-x^2} dx} = \frac{1}{2} kT$$

normalizzazione con probabilità

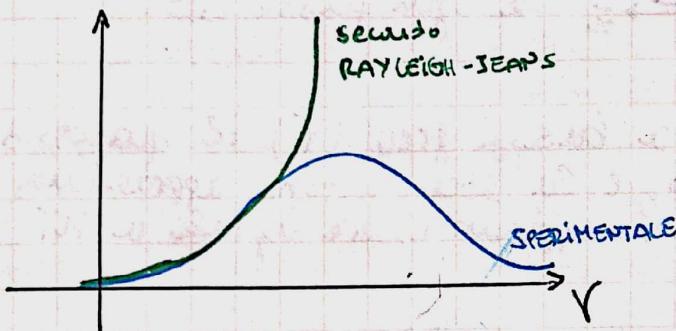
per le onde EM ci sono 2 gradi di libertà (energia del campo elettrico e del campo magnetico che si interscambiano).

$$P_T(v) = \frac{8\pi}{C^3} v^2 kT$$

ENERGIA  
VOLUME  
e FREQUENZA

25,8 meV  
(a + ambiente)

Se vediamo il confronto con lo SPETRO DEL CORPO NERO...



... giungiamo ad un ASSURDO,  
l'aumento quadratico è  
in contrasto con la realtà  
sperimentale.

↳ qualsiasi corpo nero  
irraggierebbe energia  
infinita! (impossibile)

↳ CATASTROFE NELL'ULTRAVIOLETTO!

→ il MODELLO non va bene! l'energia media è sbagliata!  
(fattoria solo a basse  $v$ )

→ nel 1900 entra in gioco Planck che afferma che

$\langle E \rangle = kT$  alle basse frequenze.

$\langle E \rangle \rightarrow 0$  alle alte frequenze.

COME FARE MATEMATICAMENTE?

Planck ipotizzò che ciascun modo non potesse assumere qualsiasi valore di energia.

Supponiamo che l'ENERGIA DEL MODO siano DISCRETI, multipli di una certa energia detta QUANTO  $\Delta E$  ( $E = m\Delta E$ )

↳ Questo QUANTO deve essere trascurabile a basse frequenze ma non ad alte frequenze; quindi proporzionale con  $v$ .

per cui lui scelse:

$$E = m \cdot \Delta E = m \cdot (\text{h} \cdot \nu) \rightarrow \text{FREQUENZA}$$

↓  
COSTANTE  
di PLANCK

### POSTULATO di PLANCK

↓  
ENERGIA:

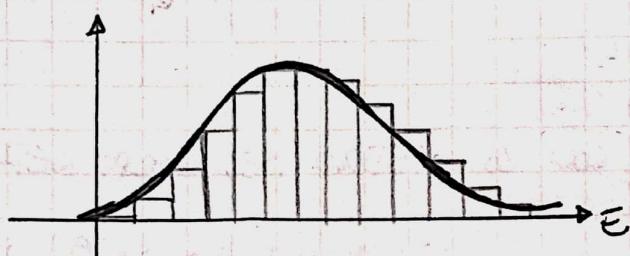
- QUANTIZZATA
- PROP. A FREQUENZA

\* NOTA: "l'energia dei modi è quantizzata" al tempo era un postulato privo di fondamento!

Calcoliamoci  $\langle E \rangle$ :

$$\langle E \rangle = \frac{\int E e^{-E/kT} dE}{\int e^{-E/kT} dE}$$

che su grafico diventa



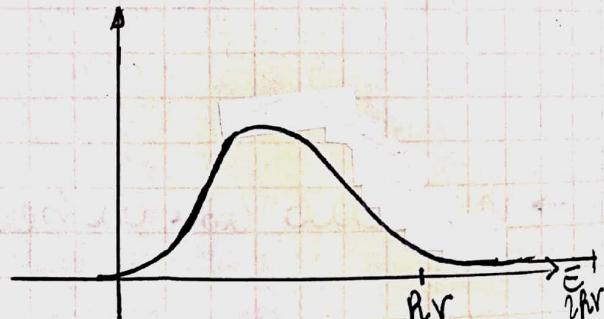
Affermare che l'energia è quantizzata vuol dire che non dobbiamo fare l'integrale, ma la sommatoria con i valori della funzione a ogni passo  $\Delta E$ .

Ora, se  $\Delta E = m \cdot h \cdot \nu$ , a bassa freq ( $\nu$ ) il quanto di energia SE è molto piccolo, e la sommatoria approssima molto bene l'integrale, che supponiamo essere uguale a  $kT$  (modello classico)

Ad alte frequenze però, se ad es. i livelli di energia disponibili ad HF sono abilal del max, l'area è trascurabile e l'energia media cresce!

Inoltre:

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \frac{\sum_{m=1}^{\infty} m h \nu e^{-\frac{m h \nu}{kT}}}{\sum_{m=1}^{\infty} e^{-\frac{m h \nu}{kT}}} = kT \times \frac{\sum m e^{-mx}}{\sum e^{-mx}} = \frac{1}{1 - e^{-x}} \\ &= -kT \times \frac{d}{dx} \left( \ln \sum e^{-mx} \right) = -kT \times \frac{d}{dx} \left[ \sum_{m=1}^{\infty} (e^{-x})^m \right] = \\ &= kT \times \frac{d}{dx} \left[ \ln (1 - e^{-x}) \right] = kT \times \frac{e^{-x}}{1 - e^{-x}} \cdot \frac{e^x}{e^x} = \\ &= kT \frac{x}{e^x - 1} = \frac{h \nu}{e^{\frac{h \nu}{kT}} - 1} \end{aligned}$$



Dunque

$$\langle E \rangle = \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}$$

ENERGIA MEDIA

DEI MODI

$$\text{dove } e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1 \approx 0 \quad \Rightarrow \quad (e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1) \approx \frac{h\nu}{kT}$$

che infatti per  $h\nu \rightarrow 0$   $\langle E \rangle \rightarrow kT$  (rispetta RAYLEIGH-SEARS)

per  $h\nu \rightarrow \infty$   $\langle E \rangle \rightarrow 0$

Possiamo quindi finalmente calcolare la DENSITÀ di ENERGIA

$$N(\nu) = \frac{8\pi}{C^3} \nu^2$$

DENSITÀ DI MODI

ENERGIA DEL CAMPO (nel modo)

$$\rho_T(\nu) = \frac{8\pi}{C^3} \nu^2 \cdot \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}$$

DENSITÀ di ENERGIA

di una CAVITÀ all'EQUILIBRIO

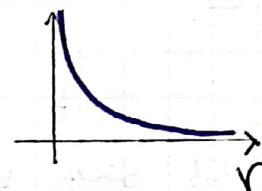
che rispetta l'andamento teorico previsto

si può evidenziare

$$\bar{n}_{BE} = \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}$$

(NUMERO MEDIO DI QUANTI NEL MODO)

DISTRIBUZIONE DI BOSE  
EINSTEIN



Questi quanti sono vere e proprie particelle (es. FOTONI)

che si propagano assieme alle onde EM (DUALISMO ONDA-PARTICELA)

↳ la natura ONDA-PARTICELA è osservabile anche in alcune relazioni che effettuano conversioni da una descrizione all'altra:

$$E = h\nu \quad \text{e} \quad \rho = \frac{h}{\lambda}$$

Quantità di moto

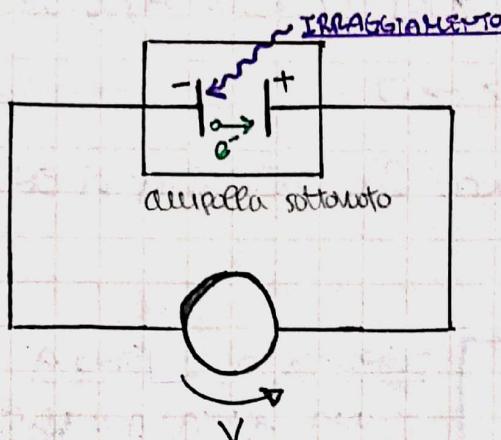
dove si passa da parametri di ONDA a parametri di PARTICELLA.

# EFFETTO FOTOELETTRICO



Cerchiamo di coniugerci ulteriormente della natura corpuscolare delle onde.

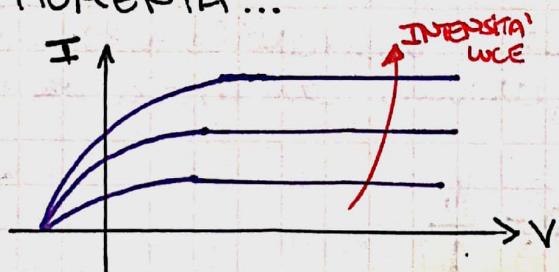
Perché si comporta un circuito elettrico illuminato?



Qui la fisica classica riesce a spiegare ...

c'è però dei PARADOSSI:

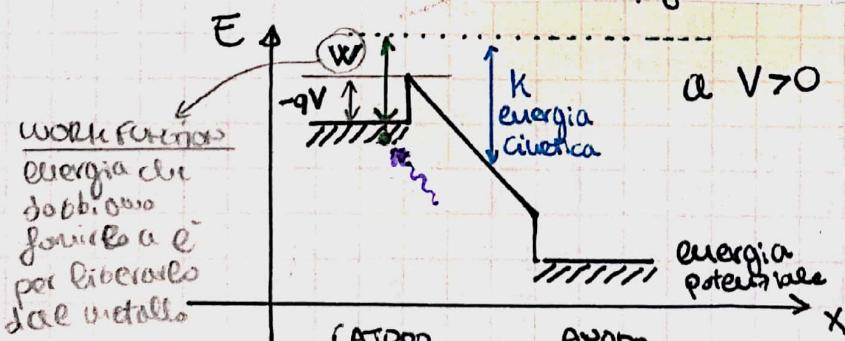
- °) CAMBIANDO L'INTENSITÀ DELLA WCE, LA CORRENTE AUMENTA ...



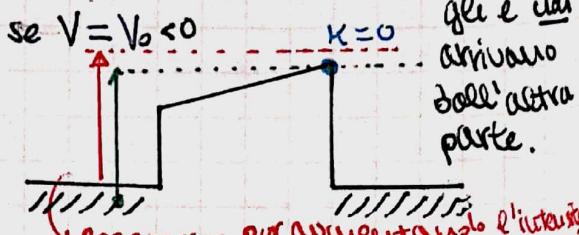
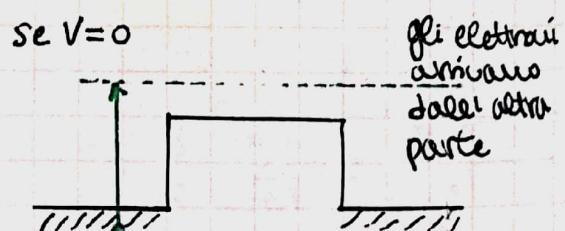
... TUTTAVIA la STOPPING VOLTAGE è sempre la STESSA (e ciò non è compatibile con la fisica classica)

→ maggiore corrente implica un maggiore campo elettrico e dunque una tensione di stoppaggio maggiore (ma ciò non accade!)

Se osserviamo l'energia nello spazio (cinetica + potenziale):

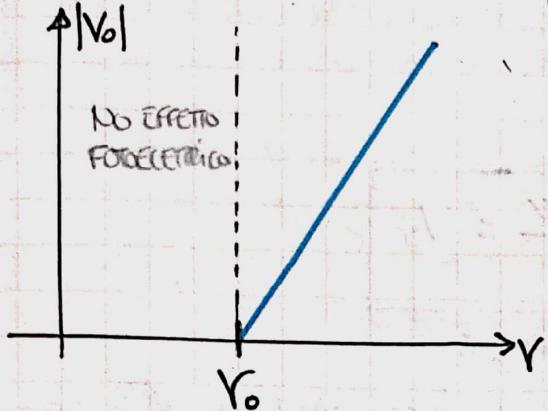


gli elettroni arrivano dall'altra parte



gli elettroni arrivano dall'altra parte.

o) se osserviamo  $|V_{ol}|$  in funzione della  $\nu$  (frequenza luce)



riducendo la frequenza al di sotto di  $V_0$  (freq. critica) NON C'E' PIU' EFFETTO FOTOELETTRICO

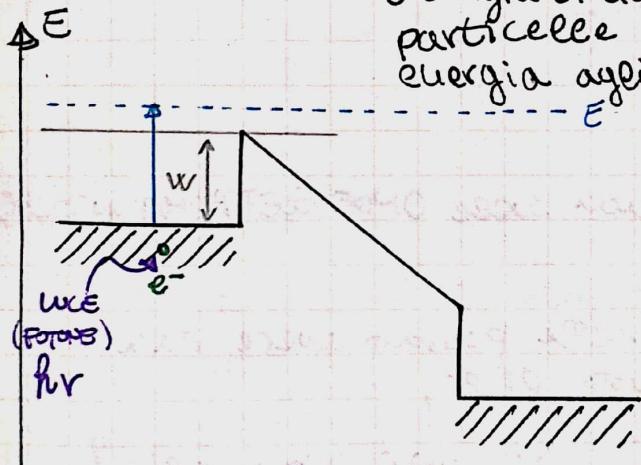
↳ Qui si spiega la fisica classica perché in teoria si potrebbe compensare la bassa frequenza con un'alta intensità luminosa

↳ invece pur aumentando l'intensità della luce, sperimentalmente l'effetto fotoelettrico NON C'E' MAI! (con  $\nu < V_0$ )

↳ Einstein nel 1905 propose di risolvere il problema usando i postulati di MAX PLANCK, ipotizzando che l'ENERGIA della luce, uguale alla RADIATIONE ELETROMAGNETICA, fosse fatta di QUANTI

$$E = h\nu$$

avendo fissata la frequenza e fissata l'energia di ciascuna di queste particelle che possono cedere energia agli elettroni



l'elettrone è assorbito il fotone aumentando la sua energia

Affinché l'elettrone possa liberarsi deve valere

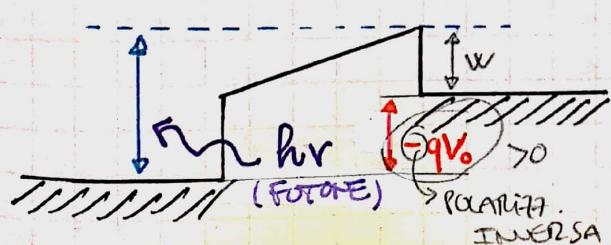
$$h\nu > W$$

ovvero

$$\nu > \frac{W}{h} = V_0$$

La frequenza per cui l'elettrone si libera è proprio la  $V_0$  'STOPPING VOLTAGE', al di sotto della quale l'elettrone non si libera mai! (ed ecco spiegato il II paradosso).

Per il I paradosso la situazione limite è la seguente



- Se aumentiamo la tensione negativa (ovvero a sx di  $V_0$ ) gli elettroni sono bloccati
- se la diminuiamo (stiamo a dx di  $V_0$ ) facoltiamo gli elettroni.

Pertanto in questa situazione circuite affinché ci sia  
EFFETTO FOTOELETTRICO deve valere:

$$h\nu \geq w - qV$$

ovvero

$$V \geq -\frac{h\nu - w}{q} = V_0$$

STOPPING VOLTAGE

che dipende linearmente dalla frequenza  $\nu$ , spiegando  
tutto dell'effetto fotoelettrico.

→ Ci si convince sempre di più della INTERPRETAZIONE QUANTISTICA DELL'ONDA ELETROMAGNETICA.



la WCE ha un'interpretazione 'da Onda' (con le  
eq. di Maxwell) oppure 'CORPOSCOLARE' (con i due esperimenti  
appena mostrati).

→ I FOTONI sono hanno massa ma hanno:

$$\text{ENERGIA } E = h\nu$$

$$\text{QUANTITÀ DI } P = h/\lambda$$

→ noi vogliamo però concentrarci non sulle Onde Elettromagnetiche,  
ma sulle PARTICELLE

→ Sappiamo finora che le particelle possono avere una  
massa, velocità, quantità di moto, energia

→ Ma le particelle hanno in visione ondulatoria?

## INTERPRETAZIONE ONDULATORIA delle PARTICELLE

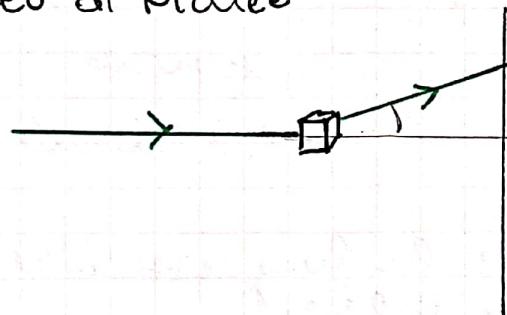
In analogia con quanto 'scoperto' con i due esperimenti di corpo nero e effetto fotoelettrico, De Broglie postulò che tali relazioni valessero anche con le particelle:

$$\lambda = h/p$$

$$v = E/h$$

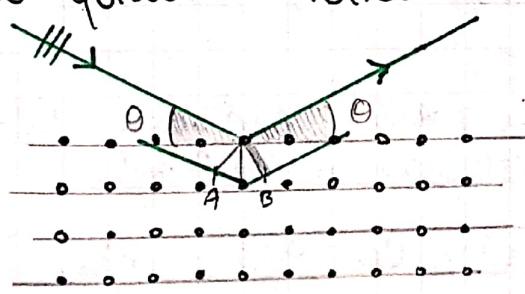
Davissou - Germer dimostrarono che la particella ha una natura ondulatoria tramite un esperimento di DIFFRAZIONE (per dimostrare tipici fenomeni di interferenza che caratterizzano i fenomeni ondulatori).

→ fecero incidere un fascio di elettroni (accelerati a 50 eV) attraverso un particolare reticolo naturale, ovvero un cristallo di nichel.



(DIFFRAZIONE di BRAGG)

Sia quindi un reticolo cristallino:



→ Possiamo evidenziare dei piani cristallini.  
Un'onda incidente viene riflessa con pari angolazione dal primo piano e quelli adiacenti

Queste onde che emergono se sono in fase danno luogo a interferenza costruttiva.

Altrimenti danno luogo a interferenza distruttiva (se non sono in fase)

→ Raggiungeremo solo sui primi due fasci (primi due piani). Il secondo fascio percorre una distanza in più AB

Se  $AB = m\lambda$  i due fasci sono in fase.

Si ricava geometricamente che

$$AB = 2a \sin\theta \quad \text{con } a : \text{passo reticolare}$$

↪  $2a \sin\theta = m\lambda$  a può variare in base alla famiglia di picci scelti.

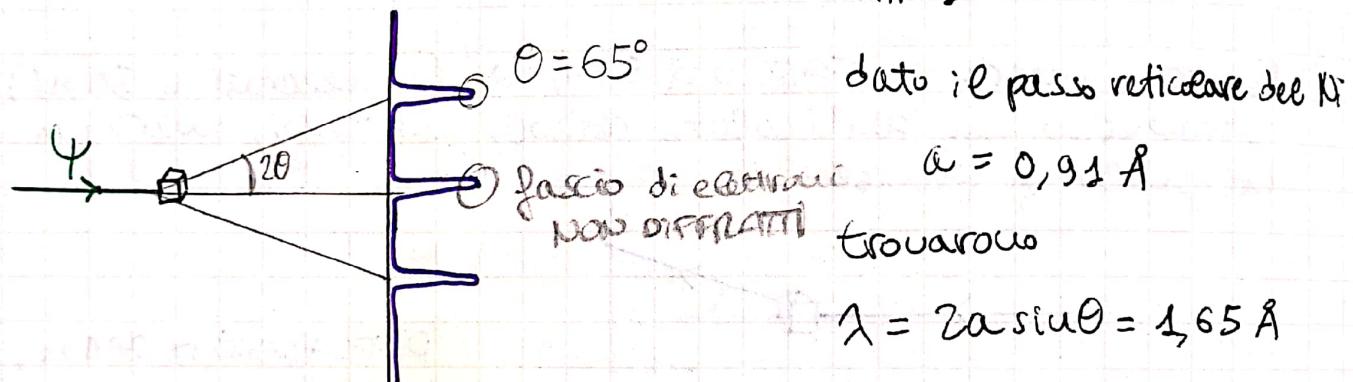
PRIMO PICCO  
di diffrazione  
(angolo più piccolo)

→ scegliendo altri picci  
verrebbero a minori e  
 $\theta$  maggiori; noi vogliamo il primo!

L'iniziale applicazione della DIFFRAZIONE DI BRAUBERG era per i raggi X. Davisson-Germer la usarono per un fascio di elettroni.

$$\sin\theta = \frac{m\lambda}{2a} < 1 \Rightarrow \lambda < \frac{2a}{m} \Rightarrow \lambda < 2a$$

$\uparrow$   
 $m=1$



dovendo quindi dimostrare che la lunghezza d'onda trovata era pari a quella teorizzata da De Broglie

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2me}} = 1,65 \text{ \AA} \text{ (concorda!)}$$

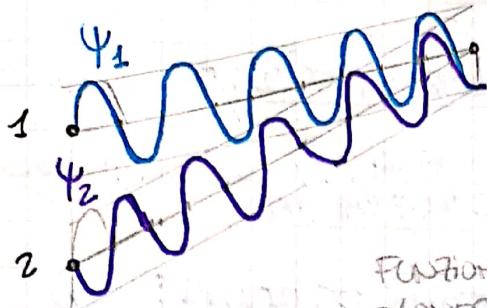
I dati sperimentali coincidevano con quelli teorizzati. Un'onda corpuscolare era descrivibile con le relazioni di De Broglie

Analogamente alle Onde EM, anche le onde corpuscolari sono descritte da un'equazione differenziale, detta EQUAZIONE DI SCHRÖDINGER, che risolta fornisce la FUNZIONE DI Onda  $\Psi$  che descrive la PARTICELLA, o meglio, la DENSITÀ DI PROBABILITÀ di trovare la PARTICELLA in una data posizione. (o in altre parole gli ORBITALI)

↪ Non potremo mai sapere LA POSIZIONE ESATTA, LA VELOCITÀ, IL MOMENTO di UNA PARTICELLA. Solo PROBABILITÀ.

Supponiamo ora una diffrazione a due fenditure (o due atomi) con onda incidente  $\Psi$ , che viene scatterata nei due punti dando luogo a due onde che ad un certo punto si incontreranno.

ad esempio, entrambe con la minima, (in fase) dando interferenza costruttiva.



FUNZIONE  
d'onda  
di un elettrone  
EMESSO  
da un punto

$$\Psi_1 = \Psi_{1,0} e^{j(kx_1 - \omega t + \varphi_1)}$$

$$\Psi_2 = \Psi_{2,0} e^{j(kx_2 - \omega t + \varphi_2)}$$

per semplicità ipotizziamo  $\varphi_1 = 0$  e  $\varphi_2 = 0$ . Consideriamo la somma delle due funzioni d'onda (perché ipotizziamo lineare l'eq. differenziale di Schrödinger).

$$\Psi = \Psi_1 + \Psi_2$$

LINEARE

$$\rightarrow \Psi = a_1 \Psi_1 + a_2 \Psi_2$$

potremmo avere le due soluzioni  $\Psi_1, \Psi_2$  a perdere una fenditura alla volta alternativamente.

Con entrambe le fenditure aperte c'è l'interferenza e il risultato è una combinazione lineare dei due effetti (siugli).

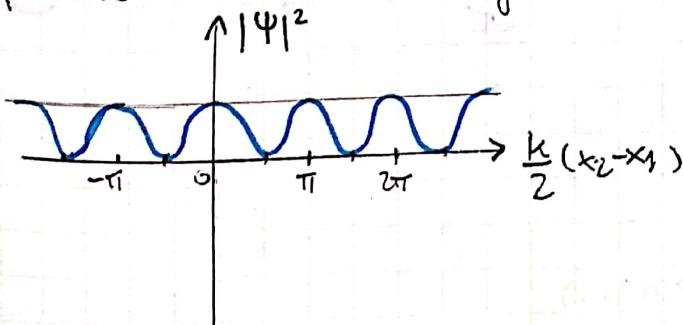
Si ottiene:

$$\begin{aligned} \Psi = \Psi_1 + \Psi_2 &= \Psi_0 e^{j(kx_1 - \omega t)} (1 + e^{jk(x_2 - x_1)}) \\ &= \Psi_0 e^{j(kx_1 - \omega t)} e^{jk(x_2 - x_1)} \cdot 2 \cos\left[\frac{k}{2}(x_2 - x_1)\right] \end{aligned}$$

Ne calcoliamo il modulo  $|\Psi|^2$

$$|\Psi|^2 = 4 |\Psi_0|^2 \cdot \cos^2\left[\frac{k}{2}(x_2 - x_1)\right]$$

Ora a seconda della differenza di cammino ottico  $(x_2 - x_1)$  possiamo avere interferenza costruttiva/distruittiva.



Saiendo  $\Psi_1$  e  $\Psi_2$  che sono ondulatorie abbiano interferenza costruttiva/distruittiva.

→ Gli elettroni mostrano un comportamento ondulatorio perché alla loro base c'è la funzione d'onda  $\Psi$ .

# l'EQUAZIONE di SCHRODINGER

Sviluppata da Schrödinger nel 1926 ci permette di studiare il comportamento di una particella.

Osserviamo dei criteri che telle equazione deve rispettare:

- 1) se risulta deve fornire una FUNZIONE D'ONDA. Deve dunque essere una EQUAZIONE DIFFERENZIALE ALLE DERIVATE PARZIALI.
- 2) deve essere coerente con i POSTULATO DI DE BROGLIE, per cui ogni PARTICELLA ha

$$\text{LUNGHEZZA D'ONDA} \quad \lambda = h/p \quad p: \text{QUANTITÀ DI MOTO}$$

$$\text{FREQUENZA} \quad \nu = E/h \quad E: \text{ENERGIA}$$

- 3) deve valere il PRINCIPIO DI CONSERVAZIONE DI ENERGIA, per cui l'energia totale è data da

$$E = K + V \quad K: \text{en. CINETICA}$$

$$V: \text{en. POTENZIALE}$$

- 4) se  $V = \text{cost.}$  (energia potenziale [§]) vuol dire ASSSENZA DI FORZE per cui  $p$  è costante e quindi anche  $\lambda$ ; lunghezza d'onda è costante.

- 5) deve essere LINEARE, per poter adottare il principio di sovrapposizione degli effetti e poter combinare le soluzioni (funzioni d'onda)

$$\Psi_1, \Psi_2 \rightarrow \Psi = a_1 \Psi_1 + a_2 \Psi_2$$

(e poter permettere l'INTERFERENZA)

Cerchiamo di ottenere tale EQUAZIONE di SCHRODINGER:

$$E = K + V = \frac{p^2}{2m} + V = \frac{\hbar^2}{2m\lambda^2} + V = \tilde{E} = \hbar\nu$$

ma  $\lambda = \frac{2\pi}{n}$  con  $n$ : vettore d'onda e  $\nu = \frac{w}{2\pi}$  con  $w$ : pulsazione (II)

da cui si ottiene

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m(2\pi)^2} + V = \frac{\hbar w}{2\pi}$$

sia poi  $k = h/2\pi$  (cost. di Planck)

Otteneremo quindi con la  $\Psi$

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V = \hbar \omega$$

usiamo **IV** ( $V$  costante) e moltiplico per una funzione d'onda  $\Psi(x,t)$  (anche se può bellissimo essere  $\Psi(x,y,z,t)$ ):

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Psi(x,t) + V_0 \Psi(x,t) = \hbar \cdot \omega \cdot \Psi(x,t)$$

$\Psi$  sarà un'onda, ad esempio piana viaggiante.

$$\Psi(x,t) = A \exp[j(kx - \omega t)]$$

vogliamo ora ottenere un'equazione differenziale. Notiamo che:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x} = j k \Psi \quad \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -k^2 \Psi \quad \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -j \omega \Psi$$

sostituendo con la derivata seconda:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi + V_0 \Psi = j \hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi$$

Riuniviamo ipotesi **IV** di  $V=\text{cost}=V_0$  e ottieniamo proprio l'eq. di Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi + V \Psi = j \hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi$$

EQUAZIONE DI  
SCHRÖDINGER  
MONODIMENSIONALE

passiamo in 3 dimensioni:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}, t) \right] \Psi = j \hbar \frac{\partial}{\partial t} (\Psi)$$

POSIETE

$$\text{con } \Psi = \Psi(\vec{r}, t)$$

EQUAZIONE DI  
SCHRÖDINGER  
TRIDIMENSIONALE.

che ha almeno una possibile soluzione (quando  $V=V_0$  è l'autopiana)

Risulteranno utili le relazioni:

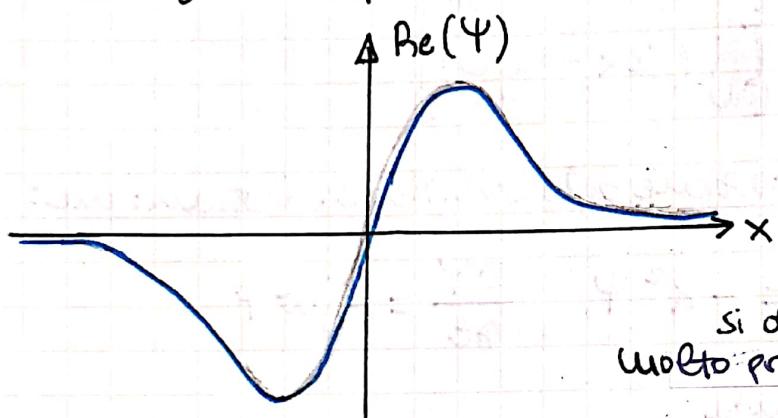
$$\lambda = \hbar/p \quad e \quad p = \hbar \cdot k$$

# MODELLO DI BORN PER L'EQ. DI SCHRÖDINGER

Born nel 1927 sviluppò un'interpretazione dell'eq. di Schrödinger. Born notò che tratta la FUNZIONE D'ONDA  $\Psi$ , questa poteva essere utilizzata un po' come si usa il campo elettrico per ricavare la posizione/concentrazione dei fotoni, nel caso della RADIAZIONE ELETTROMAGNETICA.

Born disse che  $|\Psi|^2$  dà la DENSITÀ DI PROBABILITÀ DI TROVARE LA PARTICELLA.

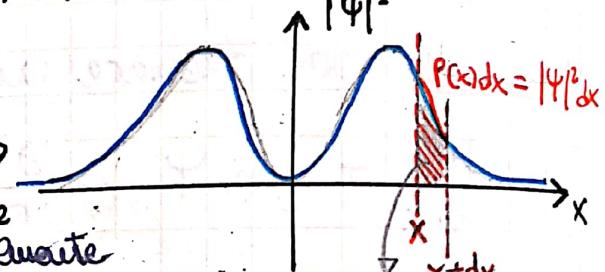
Se ad esempio la  $\Psi$  è:



Se vogliamo fare il modulo quadro:

$$|\Psi|^2 = \Psi^* \cdot \Psi$$

Si ottiene  
molto probabilmente



PROBABILITÀ DI TROVARE  
LA PARTICELLA TRA  
 $x$  e  $x+dx$

Se  $|\Psi|^2$  è una densità di probabilità allora deve valere:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 dx = 1$$

PROPRIETÀ DI NORMALIZZAZIONE

↪ ovvero la particella esiste al 100%.

Born e Schrödinger non ci dicono esattamente dove è la particella in un dato istante, ma solo la probabilità con cui la possiamo trovare IN UN DATO WOGO

↪ PRINCIPIO DI INDETERMINAZIONE DI HEISEMBERG:

l'indeterminazione sulla posizione  $\Delta x$

l'indeterminazione sulla quantità di moto  $\Delta p$

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar/2$$

La MECCANICA QUANTISTICA non è deterministica bensì probabilistica.

C'è però una limitazione alla conoscenza: infatti NON POSSIAMO ESSERE PRECISI A PIACERE NELL'INDETERMINARE LA POSIZIONE E IL MOMENTO DI UNA PARTICELLA. Se riuscissimo a confinare bellissimo la particella (dunque  $\Delta x$  molto piccolo) allora il momento  $\Delta p$  sarebbe infinitamente indeterminato (e viceversa!).

Che questi strumenti possiamo allora calcolare ad esempio la POSIZIONE MEDIA  $\langle x \rangle$  ( $\rightarrow$  valore di aspettazione):

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x \cdot |\Psi|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \cdot x \cdot \Psi dx$$

La media non ci dà la posizione esatta, anzi: nelle l'esempio  $\langle x \rangle = 0$  ma la probabilità in quel punto è zero!

Lo stesso si può fare per qualsiasi  $\langle f(x) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \cdot f(x) \cdot \Psi dx$

↳ Calcoliamo ad esempio  $\langle p_x \rangle$  (MEDIA DELLA QUANTITÀ DI MOTO) (si nota come per il principio di indeterminazione  $p$  non può dipendere da  $x$ ). Avevamo detto che:

$$\Psi(x,t) = A \exp[j(\mu x - \omega t)] \quad \hbar = 2\pi/\lambda = \frac{2\pi}{P} \quad P = p/\hbar$$

$$\frac{\partial}{\partial x} (\Psi) = j \hbar \Psi = j \frac{p}{\hbar} \Psi \quad \hookrightarrow p = \hbar k$$

da cui

$$-j\hbar \frac{\partial}{\partial x} (\Psi) = p \cdot \Psi \Rightarrow \hat{p} \Psi = p \Psi$$

possiamo definire  $\hat{p}$  è l'operatore momento  
dove

$\Psi$ : AUTOFUNZIONE DI  $\hat{p}$

$p$ : AUTOVALORE DI  $\hat{p}$

per calcolare il valore atteso  
per questo tipo di  
grandezze

Ottieniamo

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* (-j\hbar \frac{\partial}{\partial x}) \Psi dx$$

In generale vale allora

$$\langle f(x, p, t) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \cdot f(x, -j\hbar \frac{\partial}{\partial x}, t) \Psi dx$$

Possiamo immaginare altri OPERATORI come l'OPERATORE MOMENTO Partiamo da:

$$\Psi = A e^{j(\mu x - \omega t)}$$

divido tutto per un  
e ottengo l'OPERATORE  
ENERGIA CINETICA

$$\hookrightarrow \hat{p}^2 = (-j\hbar)^2 \cdot \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}$$

$$\frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} (\Psi)$$

possiamo ottenere anche l'OPERATORE ENERGIA TOTALE  $\hat{E}$

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -j\omega \psi \quad \text{con } \omega = E/\hbar$$

$$\Rightarrow j\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = E \cdot \psi \quad \Rightarrow \hat{E} \psi = E \psi$$

con  $\hat{E} = j\hbar \frac{\partial}{\partial t}$

O anche l'OPERATORE ENERGIA POTENZIALE che e' se stesso  
perche' dipende solo da  $x$  e da  $t$ .

Si puo' allora dire che vale l'uguaglianza tra operatori:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V = j\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

per i e PRINCIPI di CONSERVAZIONE DELL'ENERGIA e CHE MOLTIPLICATA  
per  $\psi$  ci RESTITUISCE UEL. DI SCARO DI PER

CHE RELAZIONI CI SONO TRA LE VARIE AUTOFUNZIONI?

Supponiamo due operatori  $\hat{A}, \hat{B}$  definiamo l'operatore  
COMUTAZIONE:  $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = \hat{C}$

ovvero valuta quanto e' comutativa una coppia di operatori.

es.

$$[x, \hat{p}] \psi = x \cdot \left( -j\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) - \left( -j\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) (x \psi) =$$

$$\text{da cui} \quad = -j\hbar x \cancel{\frac{\partial \psi}{\partial x}} + j\hbar \psi + j\hbar x \cancel{\frac{\partial \psi}{\partial x}} = j\hbar \psi \neq 0$$

ovvero non comutano e non condividono lo stesso  
set di autofunzioni.

(conferma del PRINCIPIO DI INDETERMINAZIONE DI HEISENBERG)

es. MOMENTO e ENERGIA CINETICA (comutano)

$$[\hat{p}, \frac{\hat{p}^2}{2m}] = -j\hbar \frac{\partial}{\partial x} \left( -\frac{\hbar^2 \partial^2}{2m \partial x^2} \right) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left( -j\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)$$
$$= j \frac{\hbar^3}{2m} \cdot \frac{\partial^3}{\partial x^3} - j \frac{\hbar^3}{2m} \cdot \frac{\partial^3}{\partial x^3} = 0$$

(condividono lo stesso set di autofunzioni)

COMUTAZIONE:  
Quando sono pariteti  
due operatori

## FLUSSO QUANTISTICO

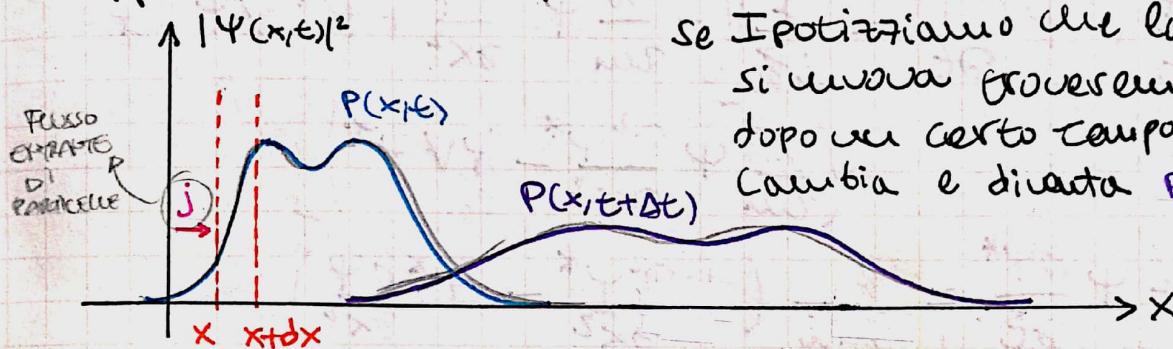
E' un'altra grandezza che riusciamo a ricavare a partire dalla funzione d'onda  $\Psi(x, t)$ .

Si intende come un flusso di particelle. Si indica con  $j(x, t)$  e ci dà informazioni sul trasporto delle particelle attraverso una superficie.

Abbiamo detto che

$$P(x, t) = |\Psi(x, t)|^2 \text{ PROBABILITÀ}$$

Supponiamo ad esempio:



Se ipotizziamo che la particella si muova avverremo che dopo un certo tempo la probabilità cambia e diventa  $P(x, t + \Delta t)$

Cerchiamo di fare un bilancio delle particelle che entrano ed escono tra  $x$  e  $x + dx$  in un certo intervallo di tempo

$$j(x) - j(x + dx) = \frac{\partial P(x|t)}{\partial x} \cdot dx$$

VARIETÀ  
IN            OUT            VARIAZIONE DELLA  
                                  DENSITÀ DI PROBABILITÀ  
                                  DI MUOVERE LA PARTICELLA  
                                  (cioè che c'è dentro)

Risolviamo in serie di Taylor:

$$j(x) - j(x) - \frac{\partial j}{\partial x} dx = \frac{\partial P}{\partial t} \cdot dx$$

$$\Rightarrow -\frac{\partial j}{\partial x} = \frac{\partial P}{\partial t}$$

Allora

$$|\Psi|^2 = \Psi^* \Psi \xrightarrow[\text{deriva da}\atop{\text{oltretempo}}]{} \frac{\partial}{\partial t} (\Psi^* \Psi) = \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \Psi \cdot \frac{\partial \Psi^*}{\partial t}$$

Cerchiamo ora di passare dalle derivate temporali a quelle spaziali, usando l'eq. di schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V \cdot \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

e le coniugato

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} + V \psi^* = -i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t}$$

infatti

$$\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \left[ \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \psi^* V \psi \right) + \left( \frac{\hbar^2}{2m} \psi \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} - \psi V \psi^* \right) \right]$$

$$\begin{aligned} \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} &= \frac{\hbar}{2mi} \left( \psi \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} - \psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right) \\ &= \frac{\hbar}{2mi} \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} \right\} \end{aligned}$$

avendo

$$-\frac{\partial j}{\partial x} = \frac{\partial P}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} (\psi^* \psi) = -\frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{\hbar}{2mi} \left( \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right) \right]$$

$$\Rightarrow j = \frac{\hbar}{2mi} \left( \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right)$$

FUSSO QUANTISTICO

NUMERO MEDIO DI PARTICOLE CHE ATTRAVERSANO LA SUPERFICIE PER UNITÀ DI TEMPO (PROBABILISTICA)

Supponiamo ora che  $V$  (che rappresenta le forze cui sono soggette le particelle) il POTENZIALE sia dipendente solo dallo spazio

$$V(x,t) \Rightarrow V(x)$$

l'eq. di Schrödinger è

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x) \cdot \Psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t}$$

In questo caso particolare scopriamo che

$$\Psi(x,t) = \underbrace{\Psi(x)}_{\text{FUNZIONE D'ONDA}} \underbrace{\varphi(t)}_{\text{AUTOFUNZIONE}}$$

FATTORE DI FASE

$\rightarrow$  SEPARAZIONE  
DEUE  
VARIABILI

ovvero la funzione d'onda è composta da due distinti contributi (uno funzione dello spazio e uno del tempo). Sostituendo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \varphi(t) \cdot \frac{d^2 \Psi(x)}{dx^2} + V(x) \Psi(x) \cdot \varphi(t) = i\hbar \Psi(x) \cdot \frac{d \varphi(t)}{dt}$$

divido a sx e dx per  $\Psi(x) \varphi(t)$  e ottengo a sx qualcosa dipendente solo dello spazio; a dx solo del tempo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{1}{\Psi(x)} \cdot \frac{d^2 \Psi(x)}{dx^2} + V(x) = i\hbar \cdot \frac{1}{\varphi(t)} \cdot \frac{d \varphi(t)}{dt}$$

$$f(x) = g(t)$$

Questa uguaglianza può valere se e solo se  $f(x) = g(t)$  sono costanti !!

$$f(x) = g(t) = \text{cost.} = E$$

e l'eq. di Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2 \Psi}{dx^2} + V(x) \cdot \Psi = E \Psi \quad \rightarrow \Psi(x) \text{ AUTOFUNZIONE}$$

$$\frac{d \Psi}{dt} = -i \frac{E}{\hbar} \Psi \quad \rightarrow \Psi(t) \text{ FATTORE DI FASE}$$

sono 'semplici' equazioni differenziali!

Risolvendo troviamo:

$$\Psi(t) = \varphi_0 e^{-i\frac{\bar{E}}{\hbar}t}$$
 (FASORE) FATTORE DI FASE

L'equazione temporale si risolve subito

è un fasore che ruota in senso orario con  $\omega = \bar{E}/\hbar$   
in accordo con quanto ipotizzato da Planck e De Broglie.

L'equazione:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2\Psi}{dx^2} + V(x)\Psi = E\Psi$$

EQUAZIONE DI SCHröDINGER  
INDIRENTANTE DAL TEMPO

in cui  $\hat{H}$  è l'operatore energia cinetica; l'energia potenziale ( $V(x)$ )  
e l'energia totale ( $E$ )

Concentriamoci su quest'ultima e definiamo:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V$$

OPERATORE HAMILTONIANO

Che ci permette di riscrivere la prima equazione come una  
EQUAZIONE ALI AUTOVALORI e AGLI AUTOFUNZIONI

$$\hat{H}\Psi = E\Psi$$

che da come soluzioni  
AUTOVALORI  $E_1, E_2, E_3, \dots$   
AUTOFUNZIONI  $\Psi_1, \Psi_2, \Psi_3, \dots$

le cui soluzioni sono un set di autovectori  $E$  associati a  
delle autofunzioni  $\Psi$

↪ ogni problema 'avrà' il suo 'hamiltoniano' in base  
al potenziale  $V$

es. nello' elettronica dello stato solido si ha un reticolo  
periodico di buche di potenziale.



# FUNZIONI D'ONDA

Supponiamo ora di voler trovare  $\Psi(x, t)$ . Allora:

$$\Psi(x, t) = \sum_{m=1}^{\infty} a_m \cdot \Psi_m(x) \cdot e^{-i \frac{E_m}{\hbar} t}$$

GENERICA  
FUNZIONE  
D'ONDA

con  $m$ : numero quantico  
(COESISTENZA DEGLI STATI)

che è una combinazione lineare di autofunzioni moltiplicata ciascuna per il proprio fattore di fase e per un coeff. complesso.

Supponiamo di voler determinare il valore di aspettativa dell'energia:

$$\langle E \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \hat{H} \Psi dx$$

OPERATORE  
ENERGIA TOTALE  
(con Hamiltoniano)

oggi misura  
della qsp. uno  
dei possibili

$E_m$   
se ripeto la  
misura sullo  
stesso sistema  
ottengo sempre  
lo stesso  $E_m$

Da cui siamo sicuri  
che se il sistema  
cadere in uno stato  
in un autostato  
(era i due coesistenti)  
in cui posso avere  
qualsiasi  $E_m$

Sviluppando:

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \hat{H} \Psi dx = \sum_{m,u} a_m^* a_u e^{i \frac{E_m - E_u}{\hbar} t} \cdot \int \Psi_m^* \hat{H} \Psi_u dx \\ &= \sum_{m,u} a_m^* a_u e^{i \frac{E_m - E_u}{\hbar} t} E_u \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_m^* \Psi_u dx}_{\otimes} \end{aligned}$$

$E_u \Psi_u$   
esce da  
integrale

se  $m = u$

⊗ vale 1 perché è una densità di probabilità integrata per tutto lo spazio

se  $m \neq u$

⊗ vale 0 perché i set di autofunzioni sono ortonormali quindi il prodotto scalare tra le autofunzioni è zero.

duque

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m^* \cdot \psi_m dx = \delta_{mm} = \begin{cases} 1 & m=m \\ 0 & m \neq m \end{cases}$$

$$\hookrightarrow \langle E \rangle = \sum_m |a_m|^2 \cdot E_m \quad \text{VALORE DI ASPETTATORE DELL'ENERGIA}$$

Somma pesata dei singoli autovalori, in cui i pesi sono  $|a_m|^2$  (coeff. della combinazione lineare della superposizione di stati), ovvero la probabilità di riscontrare una particolare autofunzione nello stato superposto

$$\sum_m |a_m|^2 = 1 \quad (\text{PROBABILITÀ})$$

Quindi:

$$\Psi(x,t) = \sum_{m=1}^{\infty} (a_m \underbrace{\psi_m(x)}_{\substack{\text{POSSIBILI} \\ \text{AUTOSTATI} \\ \text{DELLA FUNZIONE} \\ \text{DI ONDA}}}) e^{-i \frac{E_m t}{\hbar}}$$

COMBINAZIONE LINEARE  
in cui  
 $|a_m|^2$  è la  
probabilità  
di un AUTOSTATO  
o AUTOVALORE  $E_m$

(oppure

STATO NON STAZIONARIO  
perché

$|\Psi(x,t)|^2 = f(x,t)$   
dipende dal tempo.

STATO STAZIONARIO

$$\Psi(x,t) = \psi_m(x) e^{-i \frac{E_m t}{\hbar}}$$

(singolo AUTOSTATO)

$$|\Psi(x,t)|^2 = |\psi_m(x)|^2 \cdot 1 = f(x)$$

descrive un  
FLUSSO QUANTICO

Solo FUNZIONE DI  
SPAZIO

$$\begin{aligned} * \text{NOTA: } \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,t)|^2 dx &= \sum_{m,u} a_m^* a_u e^{i \frac{E_m - E_u}{\hbar} t} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m^* \psi_u dx \\ &= \sum_m |a_m|^2 = 1 \end{aligned}$$

Per cui  $\Psi(x,t)$  è <sup>m</sup> NORMALIZZATA.

la misura di  $\langle E \rangle$  e' un PROCESSO STOCHASTICO. Quando effettuiamo la misura di un sistema lo facciamo 'colezzare' su uno stato stazionario.

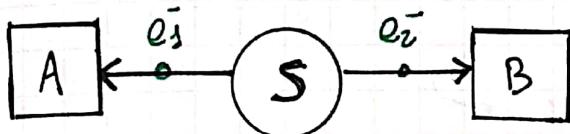
↳ prima decca misura la PARTICELLA CAPIRE IN PIÙ STATI CONTEMPO-  
-RANEAMENTE.



cio' porta a dei PARADOSSI, ad esempio:

PARADOSSO EPR: EINSTEIN-PODOLSKY-ROSEN

Supponiamo una sorgente  $S$  che genera due elettroni che vanno in due direzioni diverse, per poi essere misurati da due rivelatori A e B. (in posizioni diverse).



I due elettroni sono stati generati dalla sorgente in modo da avere un unico stato

Ovvero uno STATO ENTANGLED ('intrecciato') che non definisce il singolo stato degli elettroni, appunto presi singolarmente, ma DEFINISCE LO STATO DI DUE ELETTRONI, PRESI COME COPPIA ALL'INTERNO DELLA STESSA AUTOFUNZIONE D'ONDA

Questo e' detto 'STATO di SINGOLETTO' in cui  $e_1$  puo' avere spin su e  $e_2$  spin giu, o viceversa.

La sorgente dunque ha generato questa coppia di elettroni ma noi non sappiamo in quale dei due possibili stati siano.

$$\begin{array}{c} \uparrow \downarrow \\ \text{STATO } \Psi_{\uparrow} \end{array} \quad \begin{array}{c} \downarrow \uparrow \\ \text{STATO } \Psi_{\downarrow} \end{array} \quad ) \text{ ovvero} \quad \text{'STATO SPIN SU/GIU'}$$

In termini di funzione d'onda tale situazione e' descritta da:

$$\Psi(x_1, x_2) = a_{\uparrow} \Psi_{\uparrow} + a_{\downarrow} \Psi_{\downarrow}$$

quindi la particella viene generata dalla sorgente in questo stato non definito, sovrapposto.

gli elettroni 1 e elettrone 2 sono 'sui' in che stato si trovano;  
SI TROVANO CONTEMPORANEAMENTE NEI DUE STATI

↳ cio' che e' sicuro pero' e' che se un elettrone ha un determinato spin, l'altro avra' necessariamente spin opposto

Quando dunque l'elettrone 1 viene misurato con RIVELATORE A, se ad esempio viene misurato SPIN  $\uparrow$ , allora necessariamente l'elettrone 2 nel RIVELATORE B dovrà avere SPIN  $\downarrow$

↳ dunque...

... LA MISURA EFFETTUATA DELL'ELETTRONE 1 NELLA LOCALITÀ A (in cui si trova il rivelatore A) ci permette di conoscere già lo spin dell'elettrone 2 nella LOCALITÀ B ANCHE PRIMA DI EFFETTUARE LA MISURA

↳ e cioè se all'atto della misura di l<sub>1</sub> istantaneamente (anche più velocemente della luce) l'informazione venisse trasferita all'elettrone 2.

↳ ENTANGLEMENT

Quello uno stato che per come viene preparato implica un intreccio tra gli stati dei due elettroni qui esposto  
QUESTI SONO STATI DI STATO



TRA I DUE ELETTRONI C'È UNA SORTA DI LEGAME PER CUI QUANDO UNO VIENE MISURATO ALLORA L'ALTRO NECESSARIAMENTE E INSTANTANEAMENTE SUBISCE LO STESSO EVENTO DI COLLASSAMENTO DELLO STATO DENTRO ALLA MISURAZIONE DEL PRIMO

(COLLASSAMENTO: DA STATO DI SOVRAPPOSIZIONE)  
AD AUTOSTATO

"L'INFORMAZIONE" viaggia più velocemente della luce.

# RISOLVIMENTI DI PROBLEMI QUANTISTICI

## • PROBLEMA DELLA PARTICELLA LIBERA •

Ipotizziamo  $V=0 = \text{cost.}$  ovvero la totale assenza di forze che influenzano la particella

L'equazione di Schrödinger è

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2\psi}{dx^2}(\psi) = E\psi$$

$$\Rightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi = 0$$

ed è una equazione delle onde la cui soluzione è  $\sin/\cos$ . Risolvendo:

$$\psi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$$

$$\begin{array}{l} \uparrow \\ \text{INDEPENDE} \\ \text{DA} \\ \text{TEMPO} \end{array} \quad \text{con } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad \text{e } E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

la FUNZIONE DI ONDA si ottiene combinando anche i fattori di fase:

$$\psi = e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

$$v_f = \frac{\omega}{k} \quad \omega = E/k$$

$$x = \frac{\omega}{k} t \quad \lambda = \frac{2\pi}{k}$$

$$x = -\frac{\omega}{k} t$$

$$\hookrightarrow \psi(x, t) = A e^{i(kx - \omega t)} + B e^{i(-kx - \omega t)}$$

Che sono DUE Onde Piane VIAGGIANTI, una verso dx e l'altra verso sx.

→ IN ASSSENZA DI CAMPI/FORZE LA PARTICELLA LIBERA SI COMPOSTA COME UN'ONDA PIANA (nella funzione d'onda)

(e ciò spiega anche l'esperimento di diffrazione di DAVISSON-GERZNER)

Cerchiamo di conoscere ora qualcosa in più:

•) VALORE DI ASPETTAZIONE DEL MOMENTO  $\langle p \rangle$

per semplicità consideriamo solo l'onda piana verso dx  $\psi = A e^{ikx}$

$$\langle p \rangle = \int \psi^* \left( -i\hbar \frac{d\psi}{dx} \right) dx$$

OPERATORE MOMENTO

\*NOTA: abbiamo calcolato  $\langle p \rangle$  con la autofunzione e non come funzione d'onda (avendo abbiano escluso il fattore di fase)  
 Con il fattore di fase non cambia nulla perché sarebbe comparsa due volte, coniugato e non e il prodotto avrebbe quindi dato 1.

$$\left\{ \begin{array}{l} \langle p \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \left( -i\hbar \frac{d\Psi}{dx} \right) dx \\ \Psi = A e^{ikx} \end{array} \right.$$

Risolvendo si ottiene:

$$\begin{aligned} \langle p \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \left( -i\hbar \frac{d\Psi}{dx} \right) dx \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} A^* e^{-ikx} (-i\hbar A i k) e^{ikx} dx \\ &= \hbar k \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \cdot \Psi dx = \hbar k \end{aligned}$$

VALORE DI ASPETTAZIONE  
DEL MOMENTO

VALORE DETERMINISTICO

$$\lambda = \frac{\hbar}{P} = \frac{\hbar}{\hbar k} = \frac{2\pi}{k}$$

Dato che

ENERGIA CINETICA  
OPERATORE

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \xrightarrow{V=0} \hat{k}\Psi = \tilde{E}\Psi$$

$$\text{con } \hat{k} = -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2}{dx^2} = \frac{\hat{p}^2}{2m} \quad [\hat{k}, \hat{p}] = 0$$

Pertanto risolvendo l'equazione si trovano le autofunzioni dell'operatore energia cinetica che coincidono con le autofunzioni dell'operatore quantità di moto

↳ Sono funzioni che hanno come caratteristica quella di AVERE ENERGIA CINETICA E MOMENTO PERFETTAMENTE DETERMINATI

$$\frac{\hat{p}^2}{2m} = E \Rightarrow \text{perciò dubbio sul segno}$$

$p = \pm \hbar k = \pm \sqrt{2mE}$

(e infatti  $\Psi$  sia un contributo che si muove verso dx che verso sx)

avevamo anche detto per le principio di indeterminazione che

$$\Delta p \Delta x \geq \hbar/2$$

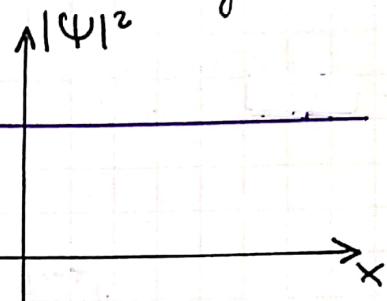
ma conoscendo perfettamente  $p$  allora  $\Delta p = 0$  (non vi è incertezza) e dunque

$$\Delta x = \infty$$

avendo raggiunto una totale determinazione del momento con una totale indeterminazione della posizione. Se infatti facciamo

$$|\Psi|^2 = |A e^{i k x}|^2 = |A|^2$$

avendo la probabilità di trovare la particella e' uguale ovunque

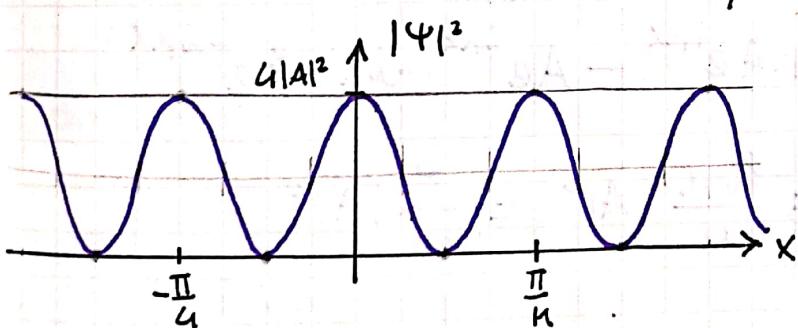


Nel caso generale invece si ha che l'energia cinetica e' perfettamente determinata:

$$|\Psi|^2 = |A e^{i k x} + B e^{-i k x}|^2 \quad E = P_{\text{kin}}^2 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

il momento non e' invece perfettamente determinato (puo' essere  $+o-$ ). Ma allora quadra con la determinazione della posizione! Infatti supponendo  $A=B$ :

$$|\Psi|^2 = |A|^2 \cdot 4 \cos^2(kx)$$



che non e' piu' uniforme ma varia con la posizione.  
(abbiamo una migliore indicazione di posizioni più o meno probabili per la particella)

→ c'e' una sorta di reticolo di probabilità.

che e' un'onda stazionaria ottenuta per interferenza di due onde piane che si muovono in direzioni diverse.

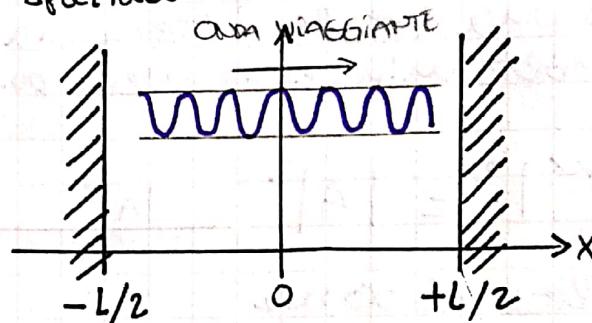
→ avevamo però sempre detto che  $\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \Psi dx = 1$   
Ma cio' accade davvero?

$$\Psi = A e^{i k x} \Rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} A^* e^{-i k x} A e^{i k x} dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |A|^2 dx \neq 1$$

Ovvero l'auto funzione non e' integrabile, e lo stesso accade anche per  $\Psi = B e^{-i k x}$  e per  $\Psi = A e^{i k x} + B e^{-i k x}$

Quello che possiamo dire circa questo problema è che:

- ) possiamo TRASCRIRE LA NORMALIZZAZIONE. Non siamo interessati a determinare A
- ) invece di integrare  $|\Psi|^2$  tra  $\pm\infty$  (ovvero assumere che la particella possa essere ovunque) ci limitiamo a studiare un intervallo opportuno lungo L (operativamente una regione spaziale limitata dell'esperimento)



$$\int_{-L/2}^{+L/2} |A|^2 dx = 1$$

Non siamo interessati a singoli coeff. (es. A) ma al rapporto con altri coeff.

Cerchiamo di calcolare ora il FLUSSO QUANTISTICO:

$$\begin{aligned} j &= \frac{\hbar}{2mi} \left( \Psi^* \frac{d\Psi}{dx} - \Psi \frac{d\Psi^*}{dx} \right) \text{ con } \Psi = Ae^{ikx} \\ &\stackrel{!}{=} \frac{\hbar}{2m \cdot i} \left( A^* e^{-ikx} \cdot ikAe^{ikx} - Ae^{ikx} (-ik)A^* e^{-ikx} \right) \\ &\stackrel{!}{=} \frac{\hbar}{2m \cdot i} 2ik|A|^2 = \frac{\hbar k}{m} |A|^2 = \frac{P}{m} |A|^2 \end{aligned}$$

Dunque:  $v = \frac{\hbar k}{m}$  ?

$$j = \frac{P}{m} |A|^2 \quad \boxed{\text{FLUSSO QUANTISTICO}}$$

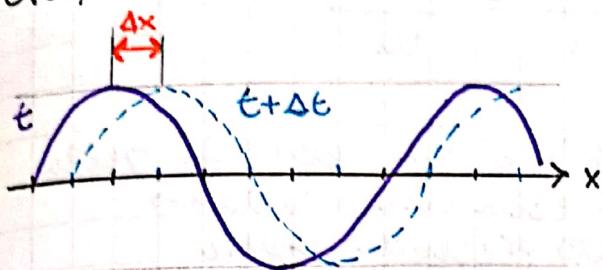
che rispetta le dimensioni di un flusso!

$$\left[ \frac{\#}{\text{cm}^2 \cdot \text{s}} = \frac{\#}{\text{cm}^3} \cdot \frac{\text{cm}}{\text{s}} \right]$$

flusso di  
PARTICELLE      DENSITÀ  
di  
PARTICELLE      VELOCITÀ

Potrebbe non essere in cui  
ma anche una densità di  
probabilità dove i e ancora  
maggiore di particelle  
incrementa la possibilità  
di trovarsi una.

ma la velocità  $v = \frac{\hbar k}{m}$  ci torna? E' in accordo alla definizione classica di velocità.  
Ora, la velocità con cui si propaga l'onda piana è  $v_g = \omega/k$



Inoltre  $\Delta x = v_g \Delta t$  **VELOCITÀ DI FASE**.

↳ La velocità di fase non è la velocità della particella.

Sviluppiamo:

$$v_g = \frac{\omega}{k} = \frac{\epsilon}{\hbar k} = \frac{\hbar^2 k^2}{2mk} = \frac{\hbar k}{2m}$$

perché la velocità di fase è la metà della velocità della particella?

$$v = \frac{\hbar k}{m} \quad \text{e} \quad v_g = \frac{\hbar k}{2m}$$

sono due cose diverse!

↳ Un modo per ricongiliare questi due concetti è riconoscere la  $v_g$  della particella all'interno di uno stato non stationario che andiamo a costruire a partire dall'onda appena sopra.



**COSTRUIAMO LO STATO NON STATIONARIO**

$$\Psi(x,t) = e^{i(k_1 x - \omega_1 t)} + e^{i(k_2 x - \omega_2 t)} \\ = e^{i(k_1 x - \omega_1 t)} \left[ 1 + e^{i(\Delta k x - \Delta \omega t)} \right]$$

DUE AUTOFUNZIONI IN  
CUI VALE LA  
RELAZIONE DI DISPERSIONE

$$\omega = E/\hbar = \frac{\hbar}{2m} \cdot k^2$$

$$\text{con } \Delta k = k_2 - k_1, \quad \Delta \omega = \omega_2 - \omega_1$$

da cui:

$$|\Psi(x,t)|^2 = |1 + e^{i(\Delta k x - \Delta \omega t)}|^2$$

CERCHIAMO DI CAPIRE  
DOVE SI TROVA LA  
PARTICELLA

Si ha un massimo quando l'argomento delle esponenziali è zero

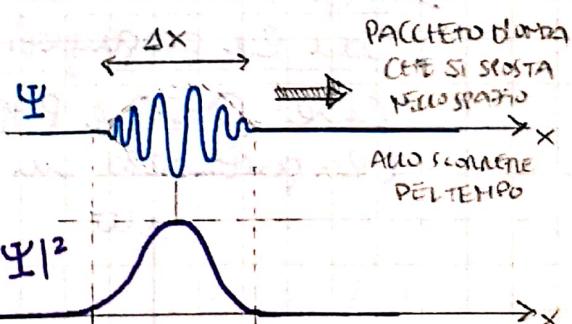
$$x = \frac{\Delta \omega}{\Delta k} t$$

$$|\Psi|^2_{\text{MAX}} = 4$$

QUESTO MASSIMO SI SPosta NELLO SPAZIO AL PASSARE DEL TEMPO E CON UNA CERTA VELOCITÀ  $v_g$

$$x = \frac{\Delta \omega}{\Delta k} t = v_g t$$

dove  $v_g$  è la VELOCITÀ DI GRUPPO (con cui viaggia il pacchetto d'onda)



con più armoniche (e non solo due) avremmo avuto  $k$  e  $w$  connessi anche discreti e la velocità di gruppo counterrebbe delle derivate.

$$v_g = \frac{dw}{dk} = \frac{d}{dk} \left( \frac{\hbar k^2}{2m} \right) = \frac{\hbar k m}{m} = \frac{\hbar k}{m}$$

$$\hookrightarrow v_g = \frac{\hbar k}{m} = v$$

dove  $v$  è la velocità della particella che avevamo trovato precedentemente

ottenuta a partire dal concetto di flusso quantistico, dal concetto di momento

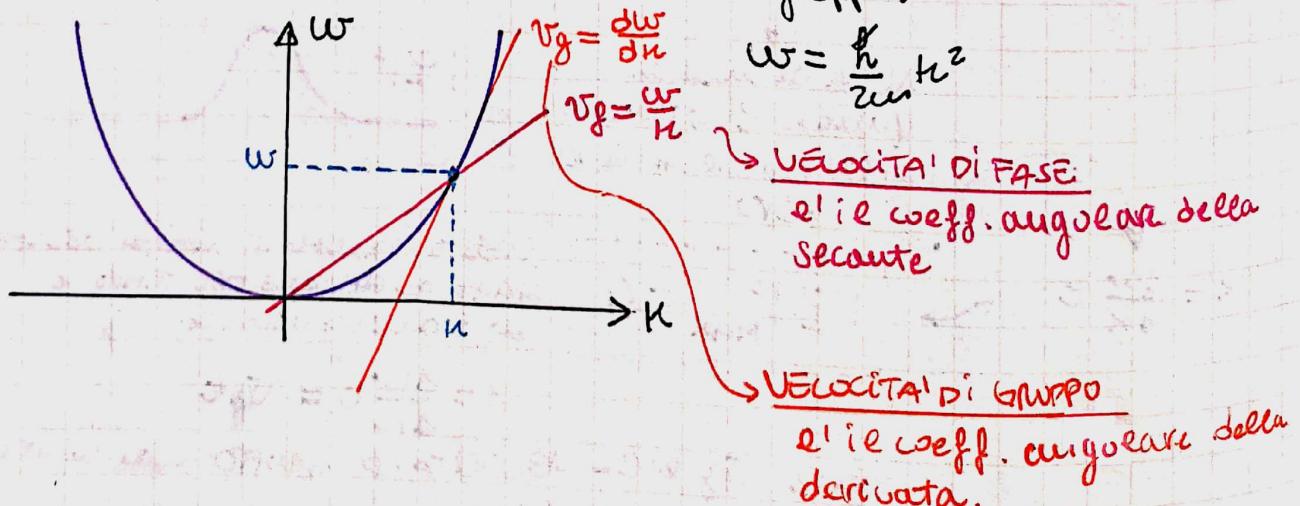
$\hookrightarrow$  contrastava con la velocità di fase dell'onda

ma se guardiamo alla particella come PACCHETTO DI Onde la velocità di gruppo torna a essere pari alla velocità della particella che avevamo trovato 'classicamente'

Dunque, in conclusione, la FUNZIONE D'ONDA  $\Psi$  ci dà molte informazioni sulla particella, come la LUNGHEZZA D'ONDA di De Broglie; sue VETTURE D'ONDA EQUIVALENTE; suo MOMENTO, sua VELOCITÀ, etc...

$\hookrightarrow$  ma non dobbiamo confondere la propagazione dell'onda con la propagazione della particella

Cioè! ONDA e PARTICELLA si muovono con VELOCITÀ DIVERSE (la particella con la velocità di gruppo)



Ricapito eando, infine, per la PARTICELA LIBERA nel caso di  $V=0$ , si trova:

$$V=0 \rightarrow E = K = \frac{P^2}{2m}$$

$$\Psi(x,t) = A e^{i(kx - \omega t)} + B e^{-i(kx - \omega t)}$$

$$\downarrow \qquad \qquad \qquad \downarrow$$

$$P = \hbar k \qquad \qquad P = -\hbar k$$

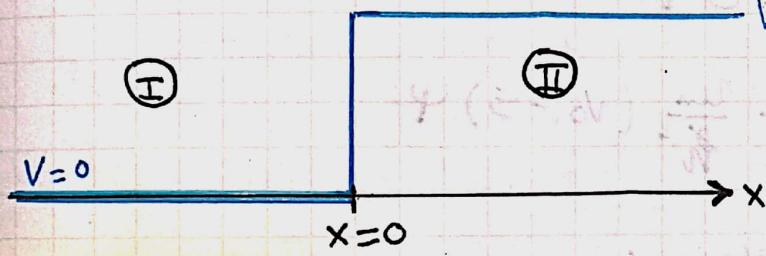
e inoltre

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \qquad E = \hbar \cdot \omega$$

## • GRADINO DI POTENZIALE •

Ovvero un potenziale costante a tratti. Il problema

è lo stesso: ovvero la particella libera.



↳ RISOLUIAMO L'EQ. DI SCHRÖDINGER NEI DUE CASI ( $x \geq 0$ ) E DOPODICHE' CERCHIAMO LE CONDIZIONI AL CONTORNO,

①  $\Psi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$   
 $\Psi(t) = e^{-i\omega t}$

② Si distinguono due casi:

→ Supponiamo la particella abbia una energia a sx. allora a dx questa si deve mantenere costante. (energia totale si conserva se idealmente non ci sono perdite)

CASO A

$$E_{\text{tot}} < V_0$$

CASO B

$$E_{\text{tot}} > V_0$$

• CASO A ( $E < V_0$ ):



Da un punto di vista quantistico possiamo provare a risolvere la equazione di Schrödinger

SX

$$\Psi(x) = Ae^{inx} + Be^{-inx}$$

$$\Psi(t) = e^{-i\omega t}$$

DX

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2\Psi}{dx^2} + V_0 \Psi = E \Psi$$

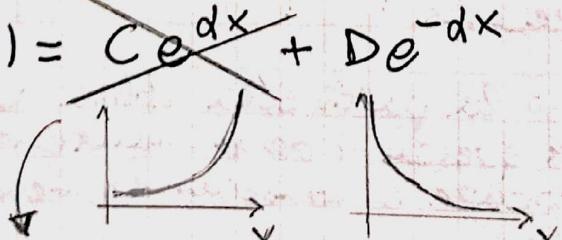
$$\Rightarrow -\frac{d^2\Psi}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E) \Psi$$

$$\Rightarrow \frac{d^2\Psi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E) \Psi$$

la funzione che derivate due volte da se stessa e' l'esponenziale

da cui ottengiamo:

~~$$\Psi(x) = Ce^{dx} + De^{-dx}$$~~



FISICAMENTE NON E' ACCETTABILE CHE UNA FUNZIONE TENDA A UN VALORE INFINITO

perche'

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi|^2 dx = 1$$

dal punto di vista classico una particella che si muovesse da SX a DX darebbe necessariamente essere riflessa indietro in  $x=0$  (PUNTO DI INVERSIONE CLASSICO)

perche'  $K$  sarebbe  $< 0$  e cio' non e' possibile.  
(classicamente)

Sarebbe vista una forza infinita in  $x=0$  (gradiute infinito)

e poi  
 $Ce^{dx}$   
NON SAREBBE POSSIBILE

I requisiti di una funzione d'onda  $\Psi(x)$ : (autofunzione)

1- FINITA (no asintoti), UN VALORE A X

(perche  $|\Psi|^2$  ci da una densita di probabilità e non possiamo avere dunque ambiguità di valori)

2-  $\Psi = \text{CONTINUA}$  (sempre per non avere ambiguità in  $|\Psi|^2$ )

↳ inoltre sia il FUSSO QUANTISTICO j

$$j = \frac{\hbar}{2m} \left( \Psi^* \frac{d\Psi}{dx} - \Psi \frac{d\Psi^*}{dx} \right)$$

Se  $\Psi$  fosse DISCONTINUA (o INFINTA) la DERIVATA sarebbe INFINTA e avremmo un FUSSO INFINTO. E ciò non è fisicamente accettabile.

3-  $\frac{d\Psi}{dx} = \text{CONTINUA}$

perche osservando l'eq. di Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2\Psi}{dx^2} + V(x)\Psi = E\Psi \quad (*)$$

Se la derivata prima non fosse continua, la derivata seconda che compare in (\*) sarebbe infinita (che vorrebbe dire che in un certo punto l'energia cinetica è infinita e ciò non è naturalmente possibile).

↳ ciò è TOLERABILE solo se ANCHE IL POTENZIALE È INFINTO (IDEALMENTE)

Possiamo allora cercare le CONDIZIONI AL CONTORNO per determinare A, B, D. Applichiamo le condizioni appena espresse:

$$\text{in } x=0 \quad \Psi(x)|_{sx} = \Psi(x)|_{dx} \Rightarrow A+B=D$$

$$\Psi(x)|_{sx} = \Psi(x)|_{dx} \Rightarrow i\kappa A - i\kappa B = -dD$$

$$\frac{d\Psi}{dx} = i\kappa A e^{i\kappa x} - i\kappa B e^{-i\kappa x} \quad \frac{d\Psi}{dx} = -dD e^{-i\kappa x}$$

mancava ancora una condizione per determinare l'ultimo parametro

↳ SFRUTTIAMO LA CONDIZIONE DI NORMALIZZAZIONE

$$\int |\Psi|^2 dx = 1$$

calle determinare infine  $\kappa^2$  e  $d$ ?

$$E = \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} \Rightarrow \kappa = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$V_0 - E = \frac{\hbar^2 d^2}{2m} \quad d = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

avendo li ricaviamo dall'energia totale; tuttavia chi ci fornisce quest'ultima?

↳  $V_0$  fra i dati del problema

↳  $E$  la 'decidiamo noi'. Avrò possibilità decidere l'energia della particella, purché sia ovviamente  $E > 0$  (perché la particella non è libellata).

Dunque dobbiamo risolvere le condizioni al contorno:

$$\begin{cases} A + B = D \\ i\kappa A - i\kappa B = -dD \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} A + B = D \\ A - B = i \frac{d}{\kappa} D \end{cases}$$

$$\int |\Psi|^2 dx = 1 \quad \Rightarrow \quad A = (1 + i \frac{d}{\kappa}) \frac{D}{2}$$

$$B = (1 - i \frac{d}{\kappa}) \frac{D}{2}$$

$D$  rimane indefinito a meno di una normalizzazione.

Le AUTOFUNZIONI DIVENTANO:

$$x < 0 \quad \Psi(x) = \frac{\kappa + id}{\kappa} \frac{D}{2} e^{i\kappa x} + \frac{\kappa - id}{\kappa} \frac{D}{2} e^{-i\kappa x} \quad \left. \begin{array}{l} \text{per } x=0 \\ \text{si} \\ \text{raccordano} \\ (\text{e la derivate} \\ \text{è continua}) \end{array} \right)$$

$$x > 0 \quad \Psi(x) = D e^{-dx} \quad \left. \begin{array}{l} \text{NON È UN'ONDA.} \\ \text{è un esp. reale decrescente} \\ \text{convergente} \end{array} \right.$$

NON C'È PROPAGAZIONE DELLA PARTICELLA  
per  $x \rightarrow \infty$ .

ALLO STESSO TEMPO PERO' ESISTE PIVITA'  
LA PROBABILITA' DI TROVARSI LA PARTICELLA  
IN  $x > 0$  (nella regione classicamente  
PROIBITA')

↳ PUNTO DI VISTA QUANTISTICO

ovvero dal punto di vista quantistico si ammette la possibilità che la particella possa entrare nella zona classicamente proibita (magari per un tempo limitato) e assumere ENERGIA CINETICA NEGATIVA.

osserviamo che  $\left| \frac{k+id}{\kappa} \right| = \left| \frac{k-id}{\kappa} \right|$ , ovvero le due onde viaggianti sono uguali in modulo.

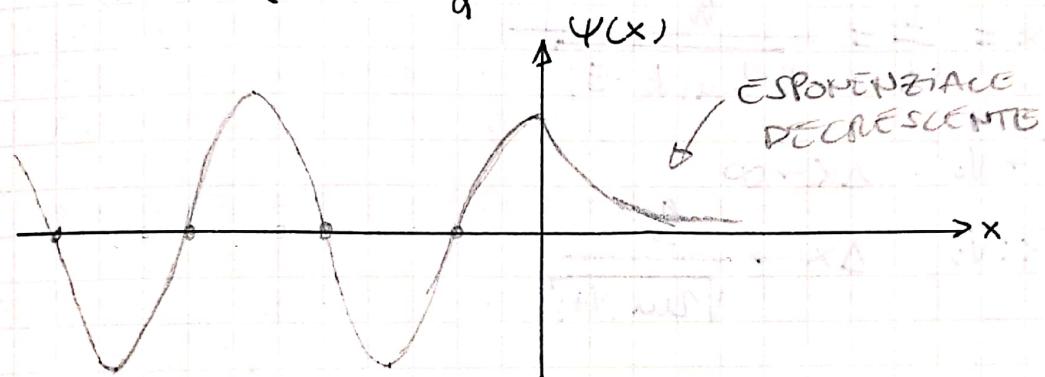
- Possiamo allora riscrivere  $\Psi(x)$  per  $x > 0$ :

$$\Psi(x) = D \cos(kx) - \frac{d}{\kappa} \cdot D \sin(kx)$$

se cerchiamo le radici:

$$D \cos(kx) - \frac{d}{\kappa} \cdot D \sin(kx) = 0$$

$$\Leftrightarrow \tan(kx) = \frac{d}{\kappa}$$



(sempre in funzione di una parte temporale  $\Psi(t) = e^{wt}$ )  
che per rotazioni di  $180^\circ$  lascia intatte le radici (nono)  
nelle rispettive posizioni.

COSTRUIRA NON ESPRIME ALUN MOVIMENTO opposte

Le onde viaggianti nelle due direzioni hanno fatto interferenza, afferendo in alcuni punti la probabilità di trovare la particella; che invece è massima nei punti di interferenza costruttiva.

- Cerchiamo allora i FLUSSI QUANTISTICI:

$$\vec{j} = \frac{\hbar k}{m} \left| \frac{k+id}{\kappa} \cdot \frac{D}{2} \right|^2 \quad (\text{applicando } j = \frac{\hbar}{2m} \cdot (\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x}))$$

$\uparrow$   
flusso verso  
 $\frac{\partial}{\partial x}$

$$= \frac{\hbar k}{m} \cdot \frac{k^2 + d^2}{\kappa^2} \cdot \frac{D^2}{4}$$

$\uparrow$   
flusso verso  $\partial x$ :

$$\vec{j}_\rightarrow = \vec{j}_\rightarrow$$

$$\downarrow$$
  
flusso verso  
sx

$\vec{j}_\rightarrow$  FLUSSO INCIDENTE

Flusso verso sx:

$\vec{j}_\leftarrow$  FLUSSO RIFLESSO

(anche per le due componenti in  $\Psi(x)$ )

) ovvero le due onde viaggianti sono in realtà ONDE STAZIONARIE  
e possiamo determinare le radici di questa funzione d'onda

- ↳ Ne consegue che non c'è ONDA TRASMESSA: i fatti se provassi a calcolare il Flusso quantistico per  $x > 0$  otterrei ZERO!  
(i termini coniugati coincidono essendo reali)
- ↳ Tutto ci sembra 'corre fisicamente'  
(come una Legge di Kirchoff)

→ Tuttavia per  $x > 0$  una probabilità residua persiste!  
Questo è detto **FENOMENO DI TUNNELING**, che in ambito quantistico proprio a indicare la tendenza delle particelle di attraversare zone classicamente proibite, in cui l'energia cinetica è negativa

↳ la particella 'penetra' per

$$\Delta x = \frac{\hbar}{d} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}$$

per  $E \rightarrow V_0$   $\Delta x \rightarrow \infty$

$$E \ll V_0 \quad \Delta x \rightarrow \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0)}}$$

→ Questo può essere anche ricavato dal PRINCIPIO DI INDETERMINAZIONE

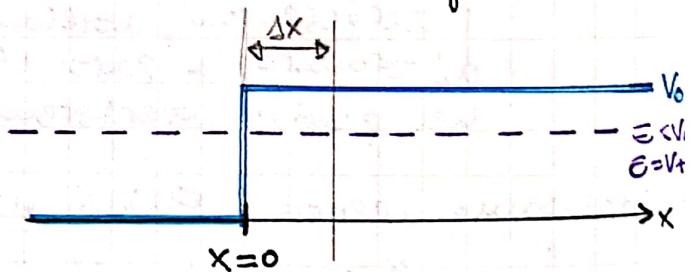
Se  $\Delta p \cdot \Delta x \approx \hbar$

REGIA INDETERMINAZIONE MOMENTO

se  $\Delta x$  è come sopra, allora  $\Delta p \approx \frac{\hbar}{\Delta x} = \sqrt{2m(V_0 - E)}$

da cui se calcoliamo l'indeterminazione sull'energia cinetica

$$\Delta E_k = \frac{\Delta p^2}{2m} \approx V_0 - E$$



avendo nella regione limitata  
di spazio (o di relativa incertezza)

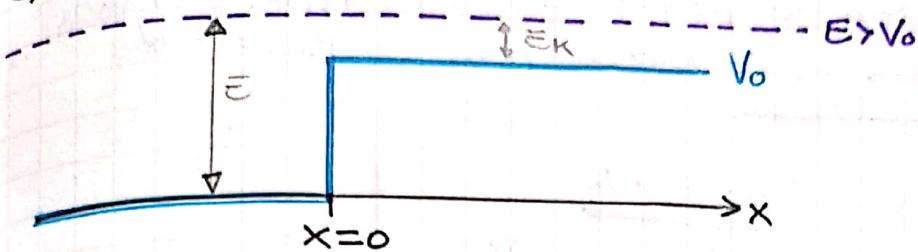
$\Delta x$  è possibile affermare che  
l'energia cinetica della particella

è indeterminata, e di una quantità proprio pari alla differenza  
 $V_0 - E$  (come osservabile graficamente)

↳ Dunque REGIONI CLASSICAMENTE PROIBITE, dove l'ENERGIA CINETICA DIVENTA NEGLIGIBILE. Solo in REALTA' AMMESSE GRAZIE ALL'INDETERMINAZIONE DELL'ENERGIA CINETICA.

→ IPOTIZZIAMO ORA IL CASO DUALE, ovvero

$$E > V_0$$



il procedimento è lo stesso:

- CALCOLO SOLUZIONI PER

$$x \geq 0$$

- CERCO CONDIZIONI AL CONTORNO.

per  $x < 0$  la riscriviamo diversamente:

$$\Psi(x) = e^{ikx} + R e^{-ikx}$$

onda incidente

onda riflessa

avendo ammesso il coefficiente moltiplicativo della

onda incidente.  
(perche' tanto uno dei coeff restera' indeterminato a valle  
delle applicazione delle condizioni al contorno, quindi  
la questione dal principio)

→ NORMALIZZAZIONE FUSSO INCIDENTE

$$j_i = \frac{\pi k}{\hbar} \quad \text{con } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

è una scelta  
 $I = j_i^2$   
(incidente)

per  $x > 0$ :

$$\Psi(x) = T e^{-ik'x}$$

$$\text{con } k' = \frac{\sqrt{2m(\bar{E}-V_0)}}{\hbar}$$

perche' T sta per TRASMESSA, avendo  
parte dell'onda incidente che riesce  
ad attraversare la barriera di  
potenziale e a proseguire in proprio  
cammino.

(le termini viaggiano verso se per  $x > 0$  è trascurabile  
perche' il problema fisico da noi impostato prevede  
particelle che vengono da  $-\infty$  e poi vengono in parte  
trasmesse, in parte riflesse; non vengono generate particelle  
a  $+\infty$ , e pertanto le termini sono giustificati)

applichiamo le condizioni al contorno:

$$\begin{cases} 1 + R = T \\ ik - ikR = ik'T \end{cases} \Rightarrow \begin{aligned} T &= \frac{2k}{k + k'} \\ R &= \frac{k - k'}{k + k'} \end{aligned}$$

$x < 0$

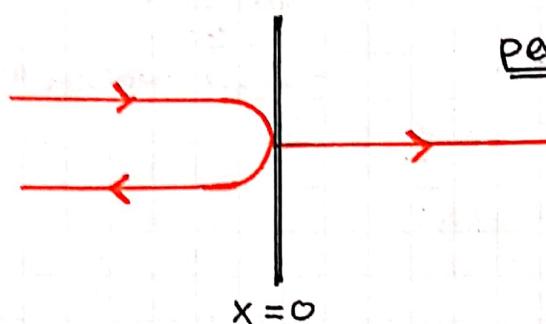
$$\Psi = e^{ikx} + \frac{k - k'}{k + k'} e^{-ikx}$$

$x > 0$

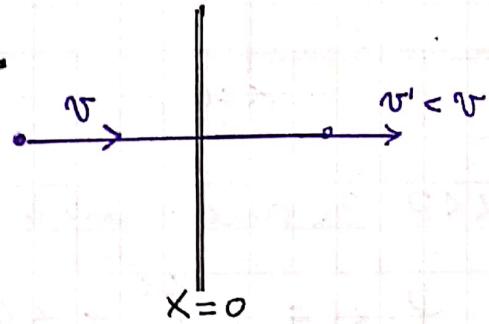
$$\Psi = \frac{2k}{k + k'} e^{ik'x}$$

→ dipendono dall'energia E che è una nostra scelta.  
di esperimento.

Le particelle si comportano come un problema di OTICA, ovvero come un'ONDA INCIDENTE (INTERPRETAZIONE ONDULATORIA) (CLASSICAMENTE invece ogni particella continuerebbe diritto con velocità smorzata)



per  $E > V_0$



INTERPRETAZIONE QUANTISTICA

INTERPRETAZIONE CLASSICA

Osservando i flussi quantistici:

$$j_I = \frac{\hbar k}{w} \quad \text{FLUSSO INCIDENTE}$$

$$j_R = \frac{\hbar k}{w} \cdot |R|^2 = \frac{\hbar k}{w} \cdot \left( \frac{k - k'}{k + k'} \right)^2 \quad \text{FLUSSO RIFLESSO}$$

$$j_T = \frac{\hbar k'}{w} |T|^2 = \frac{\hbar k'}{w} \left( \frac{2w}{k+k'} \right)^2 \quad \text{FLUSSO TRASMESSO}$$

vogliamo che il bilanciamento dei flussi sia rispettato!

$$j_I = j_R + j_T$$

$$\frac{\hbar k}{w} = \frac{\hbar k}{w} \cdot \frac{k^2 + k'^2 - 2kk' + 4kk'}{(k+k')^2} = \frac{\hbar k}{w}$$

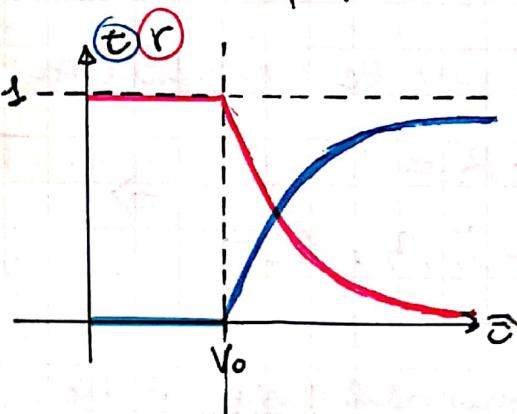
(verificato!)

Se volessimo calcolare la probabilità che la particella venga trasmessa:

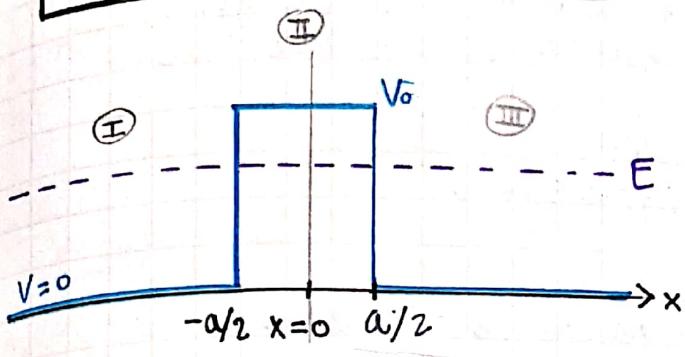
$$r = \frac{j_R}{j_I} = \left( \frac{k - k'}{k + k'} \right)^2 < 1$$

$$t = \frac{j_T}{j_I} = \frac{4kk'}{(k+k')^2} < 1$$

$$r + t = 1 \quad \begin{cases} \text{la particella} \\ \text{è riflessa} \\ \text{o è trasmessa} \end{cases}$$



## BARRIERA DI POTENZIALE



Assumiamo  $E < V_0$

I) per  $x < -a/2$

$$\Psi(x) = e^{ikx} + Be^{-ikx}$$

II) per  $-a/2 < x < +a/2$

$$\Psi(x) = Ae^{\alpha x} + Be^{-\alpha x}$$

QUESTA VOLTA  
NON LA SI PUÒ  
ESCLUDERE  
POICHE' ESSENDO  
FATTO IL DOMINIO  
NON DIVERGE

III) per  $x > +a/2$

$$\Psi(x) = Te^{ikx} \quad \left. \begin{array}{l} \text{LE PARTICELLE POSSONO} \\ \text{SOLO ANDARE IN} \\ \text{AVANTI (NO BARRIERE ALL'OO)} \end{array} \right)$$

abbiamo 4 incognite, e due equazioni al contorno per i 2 contorni.

$\rightarrow$  in  $x = -a/2$

$$\Psi_I(x) = \Psi_{II}(x)$$

$$e^{-ik\frac{a}{2}} + Be^{ik\frac{a}{2}} = Ae^{-\alpha\frac{a}{2}} + Be^{\alpha\frac{a}{2}}$$

$$\frac{d}{dx} \Psi_{\pm}(x) = \frac{d}{dx} \Psi_{II}(x)$$

$$\Rightarrow ik e^{-ik\frac{a}{2}} - ikBe^{ik\frac{a}{2}} = \alpha Ae^{-\alpha\frac{a}{2}} - \alpha Be^{\alpha\frac{a}{2}}$$

$\rightarrow$  in  $x = +a/2$

$$Ae^{\alpha\frac{a}{2}} + Be^{-\alpha\frac{a}{2}} = Te^{ik\frac{a}{2}}$$

$$\alpha Ae^{\alpha\frac{a}{2}} - \alpha Be^{-\alpha\frac{a}{2}} = ikTe^{ik\frac{a}{2}}$$

RISOLVIAMO EQ. SCHRODINGER  
NEGLI TRE REGIONI

I)  $x < -a/2$

II)  $-a/2 < x < a/2$

III)  $x > a/2$

SI APPLICANO CONDIZIONI AL CONTORNO

abbiamo ottenuto le nostre 4 equazioni per Giocouite.

→ SIAMO INTERESSATI SOLO ALL'ONDA TRASMESSA (coeff. T) ovece quanto del flusso incidente passa oltre la barriera

$$|T|^2 = \frac{J_T}{J_I} \quad \text{PROBABILITÀ DI TUNNELING}$$

Cerchiamo di ottenere T; risolvendo il sistema ...

$$T = \frac{(1 - i \frac{\kappa}{d})^2 - (1 + i \frac{\kappa}{d})^2}{(1 - i \frac{\kappa}{d})^2 e^{da} - (1 + i \frac{\kappa}{d}) e^{-da}} e^{-ika}$$

con

$$\kappa = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad d = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

ovvero dipende da ENERGIA, POTENZIALE, LARGHEZZA.

→ Possiamo sviluppare ancora T:

$$T = \frac{(1 - i \frac{\kappa}{d} + 1 + i \frac{\kappa}{d})(1 - i \frac{\kappa}{d} - 1 - i \frac{\kappa}{d})}{e^{ika} \left[ \left(1 - \frac{\kappa^2}{d^2}\right) 2 \operatorname{Sh}(da) - 2i \frac{\kappa}{d} \cdot 2 \operatorname{Ch}(da) \right]} \\ = \frac{-2i \frac{\kappa}{d} e^{-ika}}{\left[ \left(1 - \left(\frac{\kappa}{d}\right)^2\right) \operatorname{Sh}(da) - 2i \frac{\kappa}{d} \operatorname{Ch}(da) \right]}$$

Ne calcoliamo il modulo quadro per ottenere la PROBABILITÀ DI TRASMISSIONE:

$$|T|^2 = \frac{\left(2 \frac{\kappa}{d}\right)^2}{\left[1 - \left(\frac{\kappa}{d}\right)^2\right]^2 \operatorname{Sh}^2(da) + \left(\frac{2\kappa}{d}\right)^2 \operatorname{Ch}^2(da)} \\ = \frac{1}{1 + \operatorname{Sh}^2(da) + \left(\frac{1 - (\kappa/d)^2}{2\kappa/d}\right)^2 \operatorname{Sh}^2(da)}$$

$$|T|^2 = \frac{1}{1 + \frac{(1 + (\kappa_d)^2)^2}{(2\kappa_d)^2} \sin^2 d\alpha} < 1$$

### PROBABILITÀ DI TUNNELING

Cerchiamo di semplificare un po'...

$$\sin(d\alpha) = \frac{e^{d\alpha} - e^{-d\alpha}}{2} \approx \frac{1}{2} e^{d\alpha}$$

$d\alpha \gg 1$

$$\frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \text{ POTENZIALE GRANDE} \quad \text{BARRIERA LARGA}$$

PROBABILITÀ DI TUNNELING PICCOLA

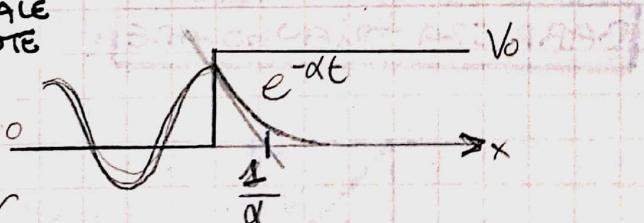
e allora, trascurando anche l'uno al denominatore (esponenziale grande), si ottiene:

$$|T|^2 \approx \left[ \frac{4\kappa_d}{1 + (\kappa_d)^2} \right]^2 e^{-2d\alpha} \quad \text{per } d\alpha \gg 1$$

↪ la probabilità è molto bassa (esponenziale piccolo)

$$|T|^2 \approx e^{-2d\alpha} \quad \text{TERMO ESPOENZIALE È DOMINANTE}$$

PROBABILITÀ DI TUNNELING APPROXIMATA PER  $d\alpha \gg 1$

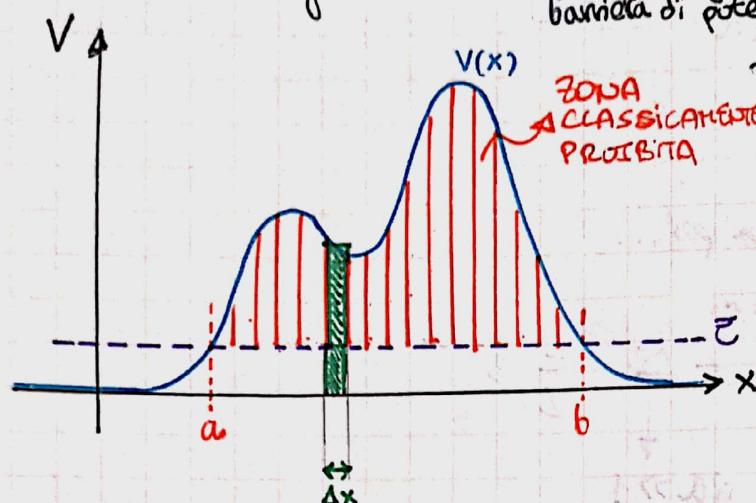


↪ abbiamlo imposto

$$d \gg \delta/d$$

## • APPROXIMAZIONE WKB •

sviluppata da Wentzel - Kramers - Brillouin. Supponiamo un  
aumento generico dell'energia in funzione dello spazio  $V(x)$   
barriera di potenziale



→ Possiamo ricordare il problema  
a una serie di barriere di potenziale:  
le rettangolari nella zona  
classicamente proibita e poste  
in successione

Allora la PROBABILITÀ DI TUNNELING, la possiamo scrivere come  
il prodotto delle probabilità indipendenti di attraversare le singole  
barriere di potenziale:

$$P_t = \prod_i P_i = \prod_i e^{-2\alpha_i \Delta x} = e^{-2 \sum_i \left( \frac{\sqrt{2m(V_i - E)}}{\hbar} \right) \Delta x}$$

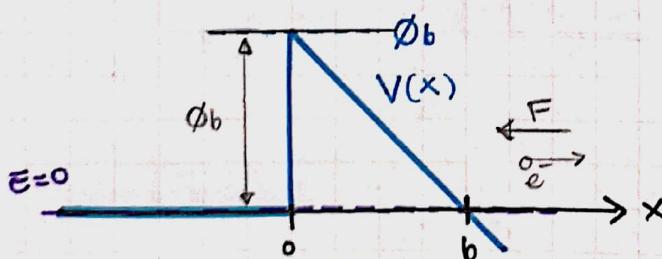
↓  
PROBABILITÀ  
SINGOLA BARRIERA  
DI POTENZIALE

passando al continuo per  $\Delta x \rightarrow 0$ :

$$P_t = e^{-2 \int_a^b \frac{\sqrt{2m[V(x)-E]}}{\hbar} dx}$$

APPROXIMAZIONE WKB PER  
PROBABILITÀ DI TUNNELING  
CON POTENZIALE  $V(x)$  GENERICO

## • BARRIERA TRIANGOLARE •



Supponiamo un elettrone che parta da sx con energia pari a zero.

$$V(x) = \Phi - qFx$$

CAMPO ELETTRICO  
CARICA

Allora applicando l'approssimazione WKB:

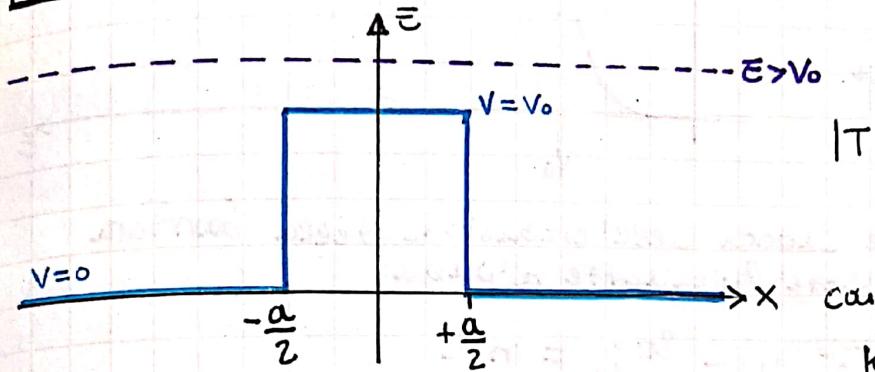
$$\begin{aligned} P_t &= \exp \left[ -2 \frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \int_0^b \sqrt{\Phi_b - qFx} dx \right] = \exp \left[ -2 \frac{\sqrt{2m}}{\hbar qF} \int_0^{\Phi_b} y^{1/2} dy \right] = \\ &= \exp \left[ -2 \frac{\sqrt{2m}}{\hbar qF} \cdot \frac{2}{3} \left[ y^{3/2} \right]_0^{\Phi_b} \right] \end{aligned}$$

per cui si ottiene:

$$P_t = e^{-\frac{4\sqrt{2m}}{3\hbar qF} \phi_b^{3/2}}$$

PROBABILITÀ DI TUNNELING DI UNA BARRIERA DI POTENZIALE TRIANGOLARE

BARRIERA DI POTENZIALE, CASO DUALE  $E > V_0$



avremo ottenuto:

$$|T|^2 = \frac{1}{1 + \left[ \frac{1 + (\kappa/\kappa')^2}{2\kappa/\kappa'} \right]^2 \operatorname{sh}^2(\kappa a)} \approx e^{-2\kappa a}$$

$$\kappa = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad \kappa' = \frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}$$

Cerchiamo di ridimensionare i risultati ottenuti:

se  $E > V_0$  allora  $\kappa$  diventa immaginario

$$\kappa = \frac{\sqrt{-2m(E-V_0)}}{\hbar} = i \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar} = i \cdot \kappa'$$

$\downarrow$   
VETTORE  
D'ONDA  
DELLA PARTICELLA  
NELLA BARRIERA

$$\text{da cui } \Psi(x) = A e^{i\kappa' x} + B e^{-i\kappa' x} \quad (E > V_0)$$

La formula trovata vale ancora, dobbiamo solo sostituire il nuovo  $\kappa$ !

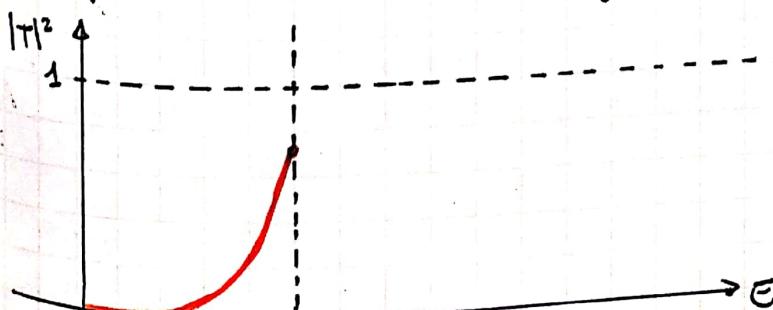
$$|T|^2 = \frac{1}{1 + \left[ \frac{1 - (\kappa/\kappa')^2}{2 \cdot (\kappa/\kappa')} \right]^2 \operatorname{sin}^2(\kappa' a)}$$

$\downarrow$   
 $\operatorname{Sh}(ix) = i \operatorname{sin}(x)$

con  $E > V_0$

Con energia superiore a  $V_0$ , la probabilità ha una dipendenza oscillatoria da  $\kappa$  e  $\kappa'$ .

↳ alcune energie della particella saranno tali da avere una probabilità di tunneling maggiore.



$$\text{per } E = V_0 \Rightarrow |T|^2 = \frac{1}{1 + \frac{1}{2} \frac{\kappa^2 a^2}{\kappa'^2}} < 1$$

i punti in cui  $\operatorname{sin}(\kappa' a) = 0$   
e dove la probabilità è max! ( $= 1$ )

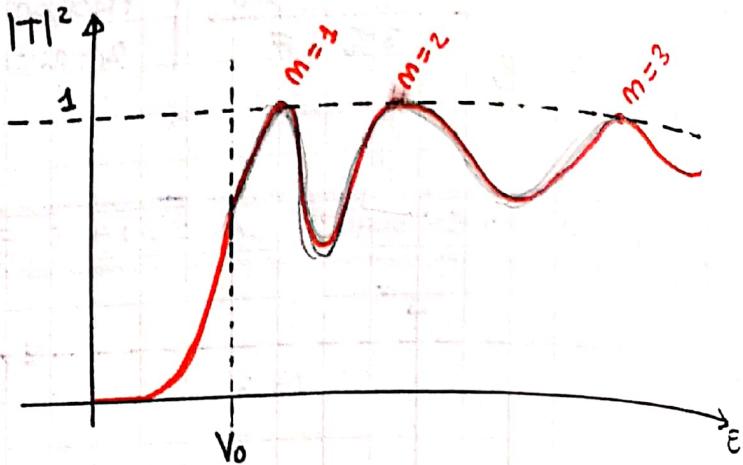
$$\kappa' a = m\pi, \quad m = 1, 2, 3, \dots$$

$$\Rightarrow E = V_0 + \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\pi^2}{a^2} \cdot m^2$$

Sviluppando si ottiene che i punti di probabilità 1 per  $E > V_0$  sono:

$$\bar{E} = V_0 + \frac{\hbar^2}{8ma^2} m^2 - 1$$

con  $m = 1, 2, 3, \dots$



→ si manifesta un fenomeno di RISONANZA, ovvero il vettore d'onda si risuona in qualche modo con l'estensione della barriera.

→ in particolare potrebbe cadere nell'estensione della barriera un numero intero di mezza lunghezze d'onda

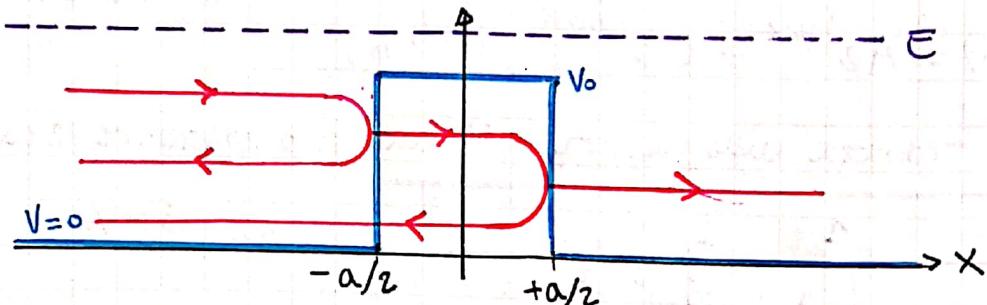
→ infatti se sostituiamo  $\mu' = 2\pi/\lambda' = m \cdot \frac{\pi}{a}$

da cui otteniamo  $a = m \cdot \frac{\lambda'}{2}$

sempre

ovvero la particella per effetto della sua energia, ha una lunghezza d'onda di De Broglie pari alla larghezza della barriera (e multipli di semilunghezze)

→ in tutte queste situazioni la probabilità è 1  
con le oscillazioni che diventano sempre più piccole e per  $E \gg V_0$  allora  $|T|^2 \rightarrow 1$



i punti in cui  $|T|^2 = 1$  sono punti di MASSIMA TRASMISSIONE del FLUSSO QUANTICO INCIDENTE.

Si può dare anche un'interpretazione 'ottica', ovvero dove  $|T|^2 = 1$  LE FUNZIONI DI Onda DELLE DUE RIFLESSIONI ALLE DUE INTERFAZIE SONO IN INTERFERENZA DISTRUTTIVA

## CASO GENERALE NON STAZIONARIO

Abbiamo per ora sempre avuto di fornire noi l'energia della partecipa:

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

Inoltre, questo ci permetteva di poter assumere:

$$\Psi = e^{i(\hbar x - \omega t)}$$

che però è un AUTOSTATO STAZIONARIO, ovvero tale che il modulo quadro  $|\Psi|^2$  non dipende dal tempo.

↳ QUESTO NATURALMENTE NON ESaurisce tutti i casi possibili ANZI, UNO DEGLI ASPECTI PIÙ INTERESSANTI DELL'EQ. DI SCHRODINGER ERA PROPRIO LA COESISTENZA DI PIÙ STATI POSSIBILI STAZIONARI E SOVRAPPONSI.

$$\Psi(x,t) = \sum_m a_m \Psi_m(x) e^{-i\omega_m t}$$

↓ FATTORE DI FASE  
CON  $\omega_m$  LEGATO  
ALL'ENERGIA  $E_m$   
 $|a_m|^2$  FUNZIONE D'ONDA  
DELO STATO  
 PESO PROBABILISTICO m-ESITO  
 DELLO STATO  
 m-ESITO

dunque il modulo quadro dipende dal tempo  $|\Psi(x,t)|^2$   
(fasi con velocità differenti)

↳ CERCHIAMO DUNQUE DI RI-STUDIARE I CASI ANALITICI NEL CASO PIÙ GENERALE DI STATI NON STAZIONARI.

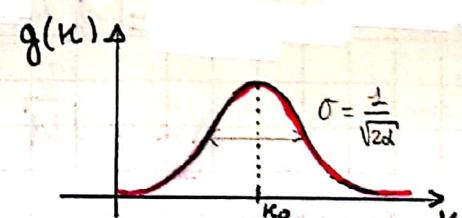
↳ **PACCHETTO D'ONDA** - STATO NON STAZIONARIO

esprimiamo lo stato non stazionario come sovrapposizione di più funzioni d'onda stazionarie piane (uno per ogni livello di energia possibile):

$$\Psi(x,t) = \int dk e^{i(\hbar k x - \omega t)} \cdot g(k)$$

con ad esempio

$$g(k) = e^{-d(k-k_0)^2}$$



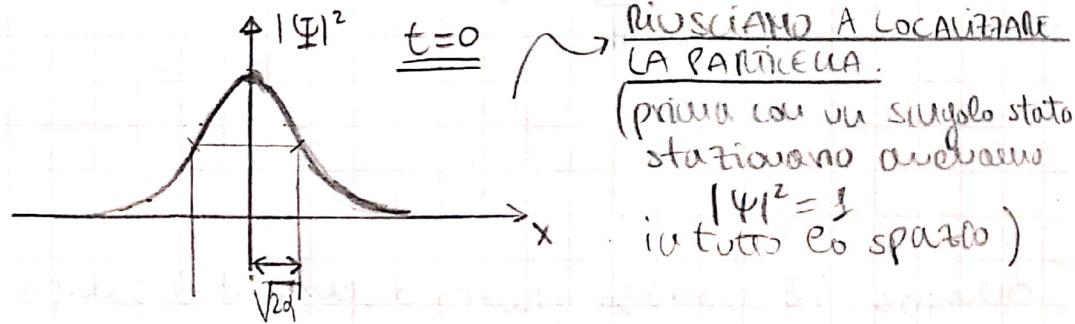
FUNZIONE GAUSSIANA

Uno spettro dei valori di  $k$  (e dunque dei livelli energetici) cui è associato il peso probabilistico con cui comporre l'annuncio di un determinato  $k$ , all'interno del pacchetto.

per semplicità calcoliamo prima l'integrale per  $t=0$ :

$$\begin{aligned}
 \Psi(x,0) &= \int_{-\infty}^{+\infty} dk \cdot e^{ikx} \cdot e^{-\alpha k'^2} \quad \text{con } k' = k - k_0 \\
 &= \int_{-\infty}^{+\infty} dk' e^{ik'x} e^{-\alpha k'^2} e^{ik_0 x} \\
 &= e^{ik_0 x} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} dk' \cdot e^{-\alpha(k'^2 - \frac{ik'x}{\alpha})} \quad \text{COMPLETO IL QUADRATO} \\
 &= e^{ik_0 x} \cdot e^{-\frac{x^2}{4\alpha}} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} dk' \cdot e^{-\alpha(k' - \frac{ix}{2\alpha})^2} \\
 &= \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} e^{ik_0 x} \cdot e^{-\frac{x^2}{4\alpha}} \quad \text{INTEGRALE DI UNA GAUSSIANA} \\
 &\qquad\qquad\qquad = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}
 \end{aligned}$$

GAUSSIANA  
(nello SPAZIO!)



notiamo che la distribuzione dei  $k$  aveva come deviazione standard  $1/\sqrt{2d}$  (e dunque anche la distribuzione dell'energia (ma soprattutto dei momenti) mentre la distribuzione della posizione ha come deviazione standard  $\sqrt{2d}$ ).

↪ è ancora una volta confermato il principio di indeterminazione. Infatti più esatto e preciso uno dei due parametri tra momento e posizione più paglierino in incertezza dell'altro!

$$\Delta p = \hbar k = \hbar / \sqrt{2d} \Rightarrow \boxed{\Delta p \cdot \Delta x = \hbar} \quad \left( \text{come il PRINCIPIO DI INDETERMINAZIONE} \right)$$

$$\Delta x = \sqrt{2d}$$

↪ Tutto questo vale però per  $t=0$ .

↪ cerchiamo di generalizzare nel tempo!

Generalizzando nel tempo:

$$\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha(k-k_0)^2} e^{i(kx-wt)} dk$$

di solito  
 $w = \frac{\hbar}{2m} k^2$

dobbiamo relazionare  $w$  con  $k$  per poterla sostituire.

$\hookrightarrow w(k)$  nell'intorno di  $k_0$  (dove vogliamo essere precisi) con sviluppo di Taylor

$$\begin{aligned} w(k) &= w(k_0) + \left. \frac{dw}{dk} \right|_{k_0} (k - k_0) + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2w}{dk^2} \right|_{k_0} (k - k_0)^2 \\ &= w_0 + v_g (k - k_0) + \beta (k - k_0)^2 \end{aligned}$$

$\downarrow$   
VELOCITÀ DI  
GRUPPO      COEFF.  
                  (PARAMETRO DI  
                  DISPERSIONE)

sostituiamo in  $\Psi(x,t)$  con  $w = k - k_0$

$$\begin{aligned} \Psi(x,t) &= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha k'^2} e^{ik'x} e^{ik_0 x} e^{-iw_0 t} e^{-ivgt k't} e^{-i\beta k'^2 t} dk' \\ &= e^{i(k_0 x - w_0 t)} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(\alpha + i\beta t) k'^2} e^{i(x - vgt) k'} dk' \end{aligned}$$

possiamo sfruttare il precedente risultato notando che:

$$k_0 x \rightarrow k_0 x - w_0 t$$

$$\alpha \rightarrow \alpha + i\beta t \quad \text{(confrontando il caso } t=0 \text{ con quello attuale)}$$

$$x \rightarrow x - vgt$$

Quindi:

$$\boxed{\Psi(x,t) = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha + i\beta t}} e^{i(k_0 x - w_0 t)} e^{-\frac{(x - vgt)^2}{4(\alpha + i\beta t)}}}$$

FUNZIONI D'ONDA  
per  
CASO NON STAZIONARIO

che è ancora una gaussiana dove

- $(x - vgt)$  è il centro del pacchetto che si sposta con velocità  $v_g$
- $(\alpha + i\beta t)$  è la larghezza del pacchetto.

Passando alla probabilità  $|\Psi(x,t)|^2$  ottieniamo:

$$|\Psi(x,t)|^2 = \frac{\pi}{\sqrt{d^2 + \beta^2 t^2}} e^{-\frac{(x - v_g t)^2}{(d + i\beta t)(d - i\beta t)}}$$

$$\Rightarrow |\Psi(x,t)|^2 = \frac{\pi}{\sqrt{d^2 + \beta^2 t^2}} e^{-\frac{(x - v_g t)^2}{d^2 + \beta^2 t^2}}$$

PROPAGAZIONE DELLA PROBABILITÀ  
di trovare la partecella nel  
spazio al variare del tempo  
(è visualizzabile)

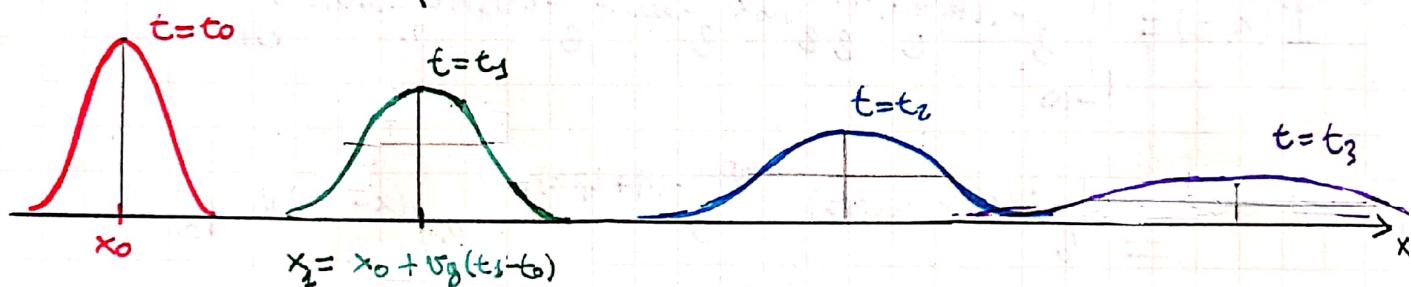
Che è una gaussiana con deviazione standard

$$2\sigma^2 = \frac{d^2 + \beta^2 t^2}{2d}$$

$$\sigma = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{d^2 + \beta^2 t^2}{d}}$$

Scopriamo che

- il pacchetto d'onda si sposta nello spazio con velocità di gruppo  $v_g$  al variare del tempo (il centro del pacchetto si sposta con moto uniforme)
- il pacchetto d'onda si allarga (la deviazione standard dipende quadraticamente dal tempo) e si attenua (l'ampiezza diminuisce col tempo)



↳ quero IL PACCHETTO SI DISPERDE (si allarga e attenua)

avevamo chiamato su RELATIONS DI DISPERSIONE

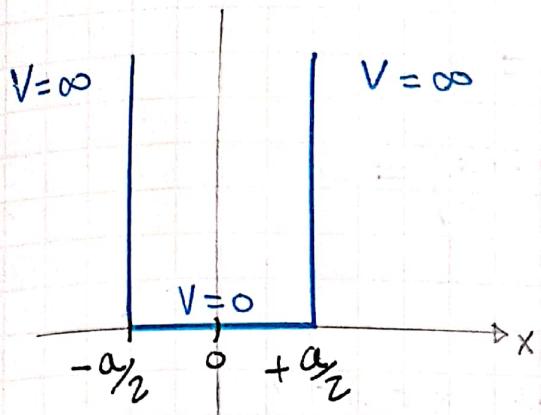
$$W = \frac{\hbar}{2m} k^2 \quad \beta = \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial k^2} W$$

appunto perché la sua derivata seconda due è  $\beta$  COMANDA LA VELOCITÀ con cui il pacchetto si attenua e si disperde.

\*NOTA: questa non è l'unica forma possibile del pacchetto.

possiamo scegliere che 'forma' dare al pacchetto, che  
non deve essere necessariamente gaussiano.

# la BUCA di POTENZIALE (POTENTIAL BOX)



Bisolviamo l'eq. di Schrödinger:

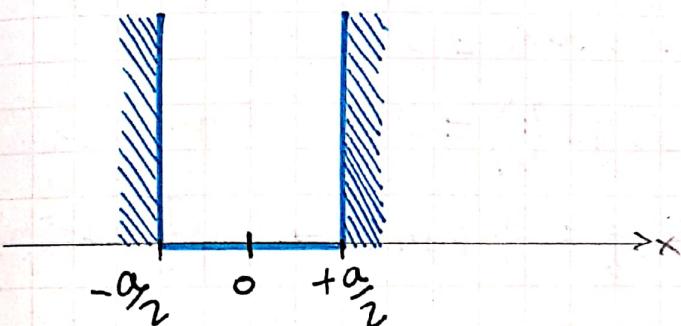
$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2}{dx^2} + V \right) \Psi = E \Psi$$

per  $x < -a/2$  e  $x > a/2$  ( $V = \infty$ )

l'unico  $\Psi$  possibile è ZERO

$$\Psi = 0$$

ovvero al di fuori dalla buca la DENSITÀ DI PROBABILITÀ DI TROVARE LA PARTICELLA È NULLA, ovvero la PARTICELLA È PERFETTIAMENTE CONFINATA (le barriere, totalmente riflettenti si disegnano come muri).



o) per  $-a/2 < x < +a/2$  ( $V = 0$ )

$$\frac{d^2 \Psi}{dx^2} = -k^2 \Psi \quad \text{con} \quad \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E$$

da cui

$$\Psi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$$

questa rappresentazione è però scaduta; usciamo:

$$\Psi(x) = A \cos kx + B \sin kx$$

Perché la particella si comporta come un'onda EM stazionaria nella cavità, così come accadeva nel corpo vero.

Le varie riflessioni si eliminano per interferenza distruttiva a eccezione dei modi cavità delle onde stazionarie, che hanno dei nodi fissi, senza alcun trasporto. Possiamo trovare la POSIZIONE di tali nodi osservando il seno e il coseno.

→ Mi aspetto di trovare delle sorte di 'MODI DI CAVITÀ', ovvero gli AUTOSTATI DELLA BUCA DI POTENZIALE

Applichiamo le condizioni al contorno: la  $\Psi$  si deve annullare in  $\pm a/2$  per la condizione di CONTINUITÀ.

$$\begin{cases} \Psi(a/2) = A \cos\left(\frac{\kappa a}{2}\right) + B \sin\left(\frac{\kappa a}{2}\right) = 0 \\ \Psi(-a/2) = A \cos\left(\kappa \frac{a}{2}\right) - B \sin\left(\kappa \frac{a}{2}\right) = 0 \end{cases}$$

è un sistema del tipo

$$\begin{cases} \alpha + \beta = 0 \\ \alpha - \beta = 0 \end{cases} \Rightarrow \text{l'unica soluzione } \alpha = \beta = 0$$

i termini si possono annullare in più modi:

I)  $A = B = 0 \Rightarrow \Psi = 0$  ) NON È SENSA PERCHE' IMPORTEBBE NESSUNA PARTICELLA.

II)  $B = 0 \Rightarrow \boxed{\Psi = A \cos \kappa x = 0}$

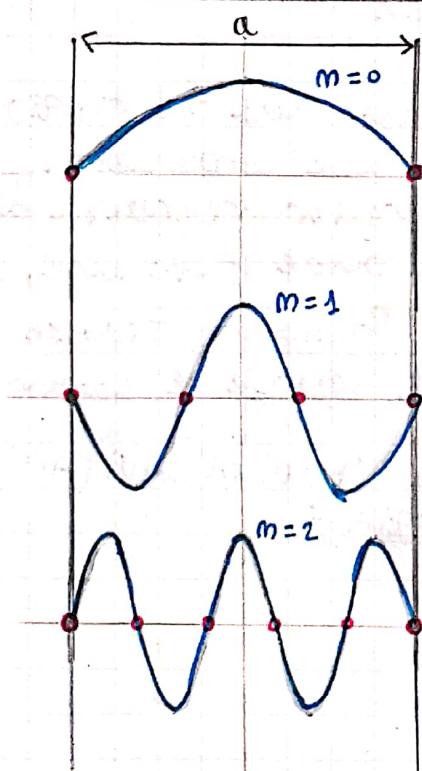
$$\Rightarrow \cos\left(\kappa \frac{a}{2}\right) = 0 \quad m = 0, 1, 2, \dots$$

AUTOFUNZIONI PARI

$$\Psi(x) = \Psi(-x)$$

$$\kappa \frac{a}{2} = \frac{\pi}{2} + 2m\pi \rightarrow \kappa = \frac{\pi}{a} (1+2m)$$

In cui vengono scelti alcuni  $\kappa$  e  $a$   $\rightsquigarrow$   $\boxed{a = \frac{\pi}{4}(1+2m) = \frac{\lambda}{2}(1+2m)}$   
 (la LARGHEZZA  $a$  della BOX deve essere un NUMERO DISPARI DI SEMILONGHEZZE DI Onda)



da cui

$$\Psi(x,t) = A \cos(\kappa x) e^{-i \omega t}$$

in cui i valori rimangono costanti anche considerando il termine di fase

$\hookrightarrow$  sono tutte le 'soluzioni pari' dell'eq. di Schrödinger.

$$\text{III}) A=0 \Rightarrow \Psi(x) = B \sin kx$$

AUTOFUNZIONI DISPARI

$$\Psi(-x) = -\Psi(x)$$

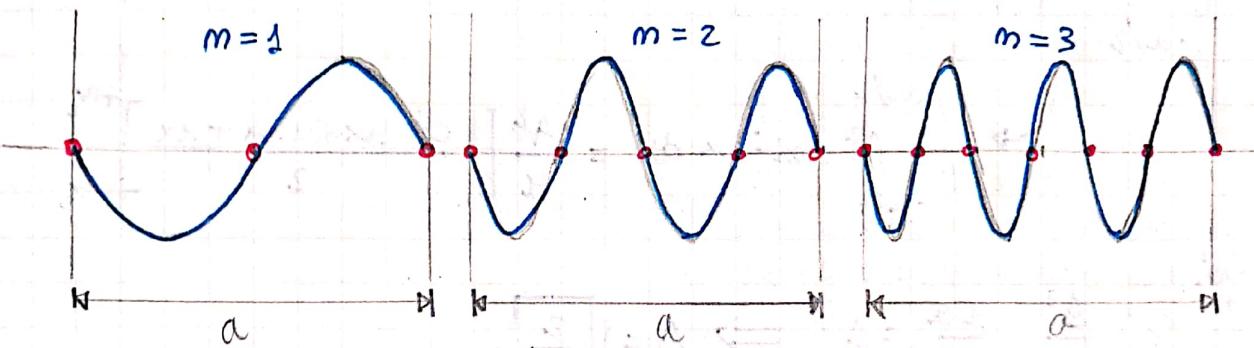
dette quali le uniche autofunzioni valide sono quelle pari:

$$\sin\left(k\frac{a}{2}\right) = 0 \rightarrow k\frac{a}{2} = m\pi \quad \text{con } m=1,2,3,\dots$$

da cui:

$$k = \frac{2\pi}{a} m \quad a = \frac{2\pi}{k} m = m\lambda = 2m \cdot \frac{\lambda}{2}$$

avendo  $a$  è un numero intero di LUNGHEZZE DI ONDA o NUERO PARI DI SEMI-LUNGHEZZE DI ONDA



Ne consegue che dato che sono accettati solo alcuni  $k$  (e non tutti) allora il numero di autofunzioni (o numeri di stati) può assumere solo quei particolari  $k$ ; e di conseguenza lo stato della particella può assumere solo DETERMINATI livelli di ENERGIA:

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

Inoltre i  $k$  accettabili sono:

$$\left. \begin{array}{l} \text{PAIRI} \quad k = \frac{\pi}{a} (2m+1) \\ \text{DISPARI} \quad k = \frac{\pi}{a} 2m \end{array} \right\} \quad \begin{array}{l} \text{m ci dice quale AUTOFUNZIONE usare.} \\ k = m \frac{\pi}{a} \quad \text{con } m=1,2,3,\dots \\ a = m \lambda/2 \end{array}$$

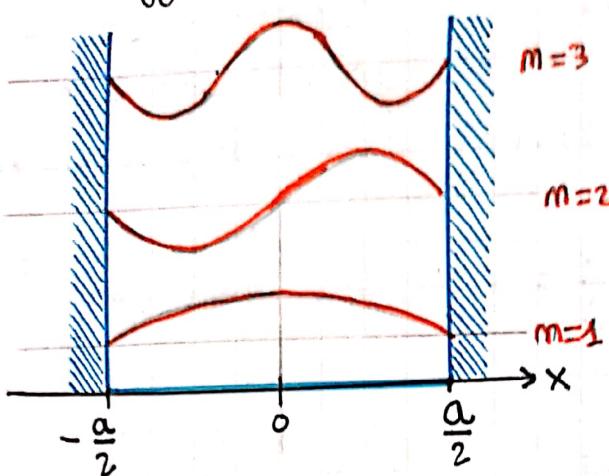
Ottieniamo quindi:

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\pi^2}{a^2} m^2 \Rightarrow E_m = \frac{\hbar^2}{8ma^2} m^2$$

(discretizzato)

LIVELLO DI ENERGIA associato al numero quantico  $m$

volendo effettuare una rappresentazione grafica:



avendo esplicitamente i livelli energetici

Sfruttiamo ora la CONDIZIONE DI NORMALIZZAZIONE:

$$\int_{-a/2}^{+a/2} |\Psi|^2 dx = 1$$

$$\int_{-a/2}^{+a/2} A^2 \cos^2 kx dx = \frac{A^2}{k} \left[ \frac{\cosh kx - \sinh kx + kx}{2} \right]_{-a/2}^{+a/2}$$

da cui

$$\frac{A^2}{k} \cdot \frac{ka}{2} = 1 \Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

e si ottiene analogamente  $B = \sqrt{2/a}$

Inoltre anche la derivata  $\Psi'(x)$  deve essere continua, ovvero dovrebbe valere al contorno

**NON NECESSARIA!**  $\Psi'(a/2) = 0 \quad \left. \begin{array}{l} \text{perche' fuori dalla buca} \\ \Psi \text{ e' nulla.} \end{array} \right.$

Tutte le autofunzioni fin qui mostrate (anche se disegno)  
NON RISPETTANO TALE CONDIZIONE, MA CIÒ NON È UN PROBLEMA PERCHE' LA  
CONDIZIONE AL CONTORNO SULLA DERIVATA IN QUESTO CONTESTO NON VALE.

Il motivo per cui tale condizione era stata introdotta è perche'

$$-\frac{\hbar^2}{m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi + V(x) \Psi = E \Psi$$

quando trattiamo l'eq. di Schrödinger  
se la derivata prima non è continua  
allora la derivata seconda può valere  
infinito.

Ma in questo caso al contorno anche  $V$  va a infinito, dunque  
la derivata seconda non deve essere necessariamente finita,  
anzi, se fosse infinita potrebbe anche compensare il  $V$  infinito.

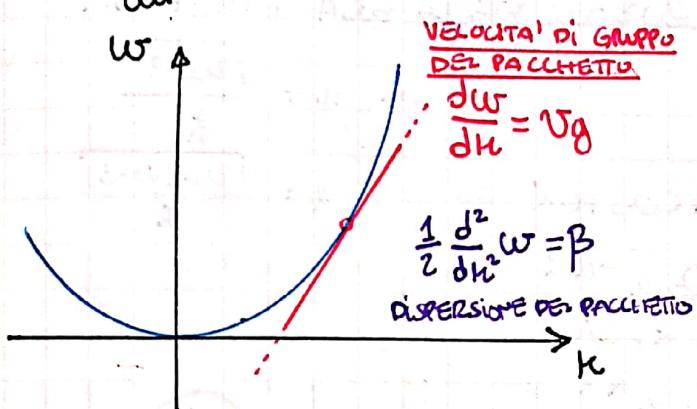
i livelli di energia  $E_m$  (avendo gli AUTOUACOPI) non si annientano mai.

Il primo autouacero  $E_1$  e' detto ENERGIA DI PUNTO ZERO. In altre parole tutte le volte che andiamo a confinare una particella in una buca non troveremo mai come soluzioine di energia un'ENERGIA nulla ( $E=0$  non e' una soluzione del problema quantistico) e cio' accade per TUTTI I SISTEMI QUANTICI DI CONFINAMENTO.

In meccanica quantistica non esiste una soluzione di quiete, esiste sempre un'energia di punto zero per cui la particella e' in movimento.

Osserviamo ora la RELAZIONE DI DISPERSIONE. Avremo trovato che

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



→ esiste ancora, in questo specifico problema una RELAZIONE DI DISPERSIONE che ci quantifica quanto velocemente si disperde il pacchetto?

NO! NON E' DEFINIBILE.

perche' avremo un campionamento della relazione di dispersione.

(DISCRETIZZAZIONE DEI  $k$  e DEI VALORI DI ENERGIA (ci corrisponde un AUTOSTATO STAZIONARIO))

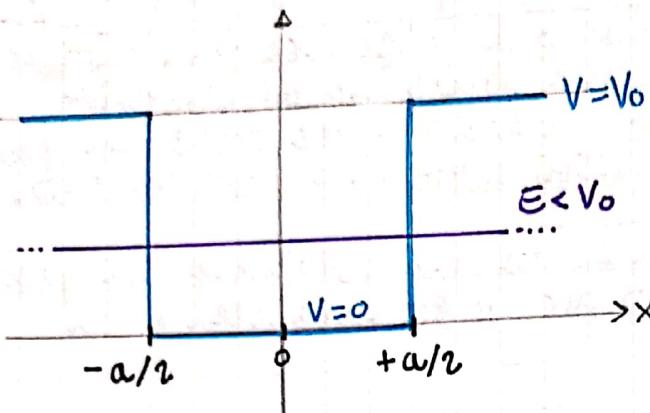
\*NOTA: quando un potenziale  $V(x)$  e' simmetrico le autofunzioine  $\Psi$  soluzioine delle eq. di Schrödinger e' sempre

$$\Psi(-x) = \pm \Psi(x)$$

ovvero  $\Psi$  e' PARI o DISPARI, con le due soluzioini energeticamente alterne.

\*NOTA: con autofunzionali STAZIONARIE il FLUSSO QUANTISTICO e' NULLO.

## BUCA DI POTENZIALE FINITA



quando all'esterno della buca il potenziale non e' più infinito i calcoli sono più complicati.

→ occorre calcolare le soluzioni dell'eq. di Schrödinger nell'interno e all'esterno della buca.

ci interessa  $E < V_0$  (se  $E > V_0$  il problema non è confinato). La soluzione è comunque unica e interscambiabile

Data la simmetria di  $V(x)$  le soluzioni sono PARI o DISPARI.

SOLUZIONE PARI

$$\hookrightarrow \underline{\text{PURA BUCA}} \quad \Psi = A \cos kx$$

$$\hookrightarrow \underline{\text{Fuori dalla buca}} \quad \Psi = B e^{-dx} \quad ) \text{ MANCA GIUSTAMENTE } e^{dx} \text{ CHE DIVERGIREBBE (NON HA SIGNIFICATO FISICO)}$$

$$\begin{cases} \Psi = B e^{dx} \\ \text{se } x < -a/2 \end{cases}$$

le condizioni al contorno

$$\begin{cases} \Psi(a/2)^+ = \Psi(a/2)^- \\ \Psi'(a/2)^+ = \Psi'(a/2)^- \end{cases}$$

(lo stesso in  $-a/2$ ) dato che sol. è pari se le C.A.C. valgono a dx, sono valide anche a sx

$$\Rightarrow \begin{cases} A \cos\left(\frac{\kappa a}{2}\right) = B e^{-d\frac{a}{2}} \\ -A \kappa \sin\left(\frac{\kappa a}{2}\right) = -B d e^{-d\frac{a}{2}} \end{cases}$$

con le incognite  $A, B, \kappa, d$   
qui ci sono 3 incognite in 2 eq.  
Ma ci interessa solo  $\kappa$ .

$$\Rightarrow \tan\left(\frac{\kappa a}{2}\right) = \frac{d}{\kappa}$$

la risolviamo GRAFICAMENTE.

$$\hookrightarrow \boxed{\tan\left(\frac{a}{2\kappa} \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\right) = \sqrt{\frac{V_0 - E}{E}}}$$

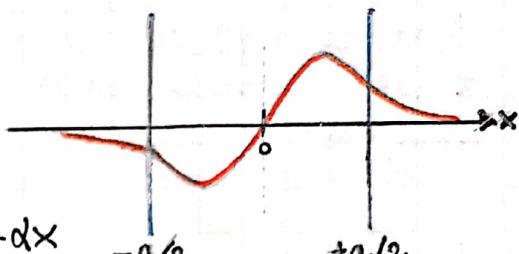
CONDIZIONE AL CONTORNO  
AUTOFUNZIONE PARI

unica incognita  $\rightarrow E !$

## SOLUZIONE DISPARI

↳ Nei buchi

$$\Psi = A \sin(\mu x)$$



↳ Fuori dalla buca

$$\text{per } x > a/2 \quad \Psi = B e^{-\alpha x}$$

$$x < -a/2 \quad \Psi = -B e^{\alpha x}$$

applichiamo le C.A.C.

l'autofunzione deve essere dispari!

$$\begin{cases} A \sin\left(\mu \frac{a}{2}\right) = B e^{-\alpha \frac{a}{2}} \\ \mu A \cos\left(\mu \frac{a}{2}\right) = -\alpha B e^{-\alpha \frac{a}{2}} \end{cases}$$

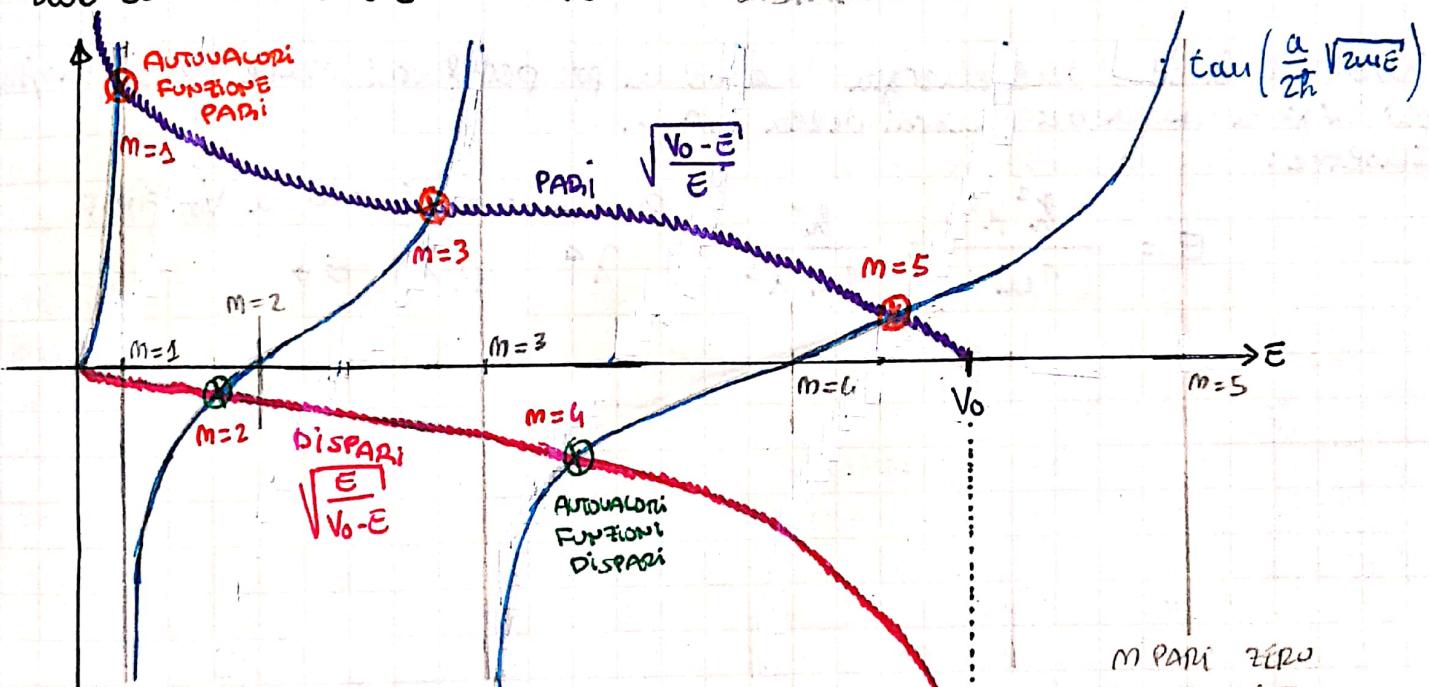
$$\Rightarrow \tan\left(\mu \frac{a}{2}\right) = -\frac{\kappa}{\alpha}$$



$$\tan\left(\frac{a}{2h} \sqrt{2mE}\right) = -\sqrt{\frac{E}{V_0 - E}}$$

CONDIZIONE AL CONTORNO AUTOFUNZIONE DISPARI

↳ Risolviamo graficamente le due condizioni al contorno:



ASINTOTI:  $\frac{a}{2h} \sqrt{2mE} = \frac{\pi}{2} (1+2m)$

ZERI:  $\frac{a}{2h} \sqrt{2mE} = 2m \frac{\pi}{2}$

$A/2 \Rightarrow \frac{a}{2h} \sqrt{2mE} = m \frac{\pi}{2}$

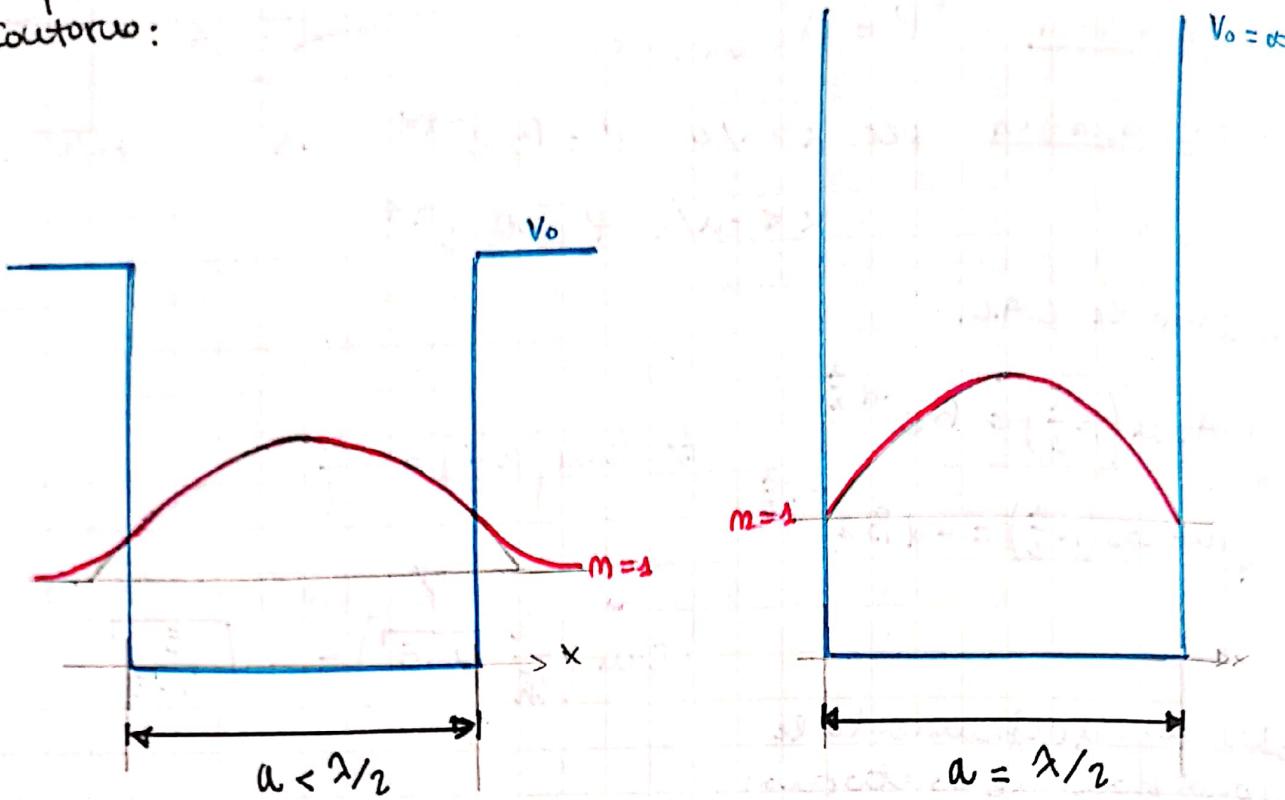
$\Rightarrow E = \frac{1}{2m} \left( \frac{\pi}{a} h m \right)^2 = \frac{\hbar^2}{8ma^2} m^2$

Per  $V_0 \rightarrow \infty$  la III e IV sarebbero tali da rendere gli autovvalori sempre più vicini agli asintoti/zeri (dunque i livelli energetici ideali)

Autovvalori IDEALI  
(come BARRIERA INFINTA!)

↳ GLI AUTOVVALORI ENERGETICI REALI SONO DUNQUE SEMPRE INFERIORI A quelli IDEALI (BARRIERA INFINTA  $V_0 = \infty$ )

Questa differenza tra gli autovalori della BUCA FINITA rispetto a quelli della BUCA 'INFINTA' e' spiegabile con le condizioni al contorno:

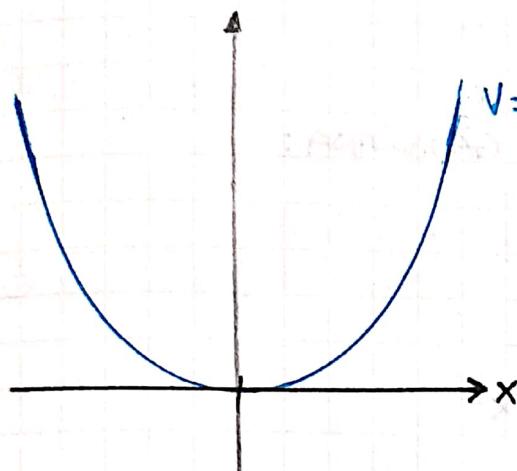


Ovvero il livello dell'energia 'scende' un po' per farci stare il coseno/sen più largo a causa dei raccordi della C.A.C.

Inoltre:

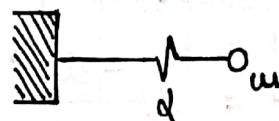
$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m \lambda^2}$$

Passando da  $V_0 = \infty$  a  $V_0$  FINITO  
 $\lambda \uparrow$  quindi  $E \downarrow$



$$V = \frac{1}{2} \alpha x^2$$

'classicamente' corrisponderebbe a una massa e una molla

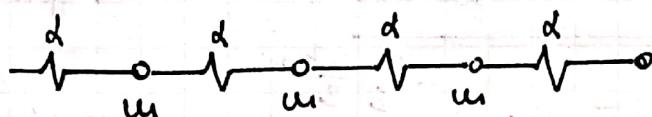


$$F = -\alpha x \quad (\text{tirando la molla per } x \text{ positive} (\delta x) \text{ la molla richiama verso sx})$$

il cui potenziale è proprio  $\frac{1}{2} \alpha x^2$

Nella fisica della materia gli oscillatori armonici sono molto comuni, ad esempio la forza che lega due atomi:

RETIColo di BRAVAIS  
MONODIMENSIONALE  
MODELIZZATO



Il cristallo con è statico, ma in continuo movimento, e ciascun atomo è legato all'altro proprio come delle masse e delle molle in cascata, in cui la posizione di ciascun atomo influenza la posizione degli altri.

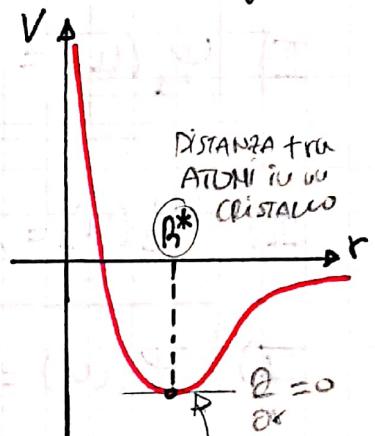
Ad esempio il potenziale fra due atomi in funzione della distanza  $r$  tra di essi varia così come:

↳ se proviamo ad accartoccare o comprimere gli atomi il gradiente del potenziale è tale da riportarci nella condizione di equilibrio; in assenza di altre forze, a distanza  $R^*$  che è il caso studiato da noi studiato.

nel intorno di  $R^*$ :

$$V(r) \approx V(R^*) + \frac{dV}{dr}(r-R^*) + \frac{1}{2} \frac{d^2V}{dr^2}(r-R^*)^2 \quad (\text{Sviluppo di Taylor con derivata prima nulla})$$

$\downarrow$   
trascuriamo



DISTANZA TRA ATOMI IN UN CRISTALLO  
 $R^*$   
 $R = 0$   
in  $R^*$  posizionare  
approssimare con  
una parabola.

Tale modello descrive per esempio come si propagano le onde acustiche vibrazionali nei solidi cristallini con una analogia particolare detta FONONE. Tali onde si propagano nel solido con energie e momenti quantizzati; i quanti delle onde vibrazionali nel solido (ovvero l'ENERGIA DEL FONONE) sono proprio gli stati, autovetori del potenziale parabolico.

scriviamo l'eq. di Schrödinger per questo problema:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2}{dx^2} \psi + \frac{1}{2} \alpha x^2 \psi = E \psi$$

una possibile soluzione  $\psi$  è la funzione GAUSSIANA:

$$\psi = e^{-\delta x^2} \quad ) \text{ aless. coeff. non-perturbativo}$$

(ottenibile da condizione di NORMALIZZAZIONE)

che possiamo scrivere

$$\psi'' = -2\delta e^{-\delta x^2} + (2\delta x)^2 e^{-\delta x^2}$$

per cui esistono particolari  $E, \delta$ .

Non è l'unica soluzione possibile. Possiamo trovare una intera famiglia di autofunzioni, tra cui la gaussiana:

I)  $\Psi_0(u) = A_0 e^{-\frac{u^2}{2}}$  PARI      con  $u = x \sqrt{\frac{\alpha m}{2}}$  (con  $\alpha$  in  $V(x)$ )

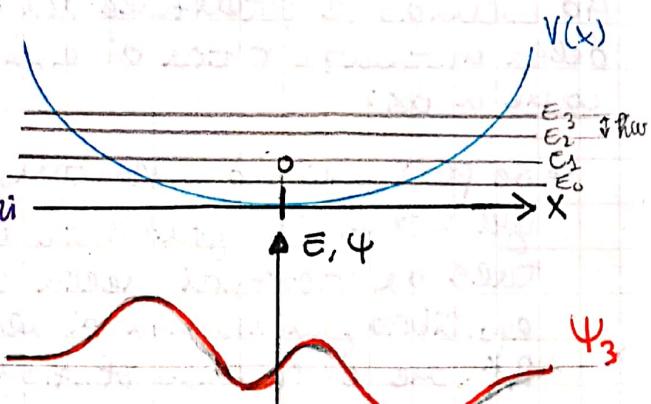
AUTOFUNZIONE A  
MINORE ENERGIA  
(GAUSSIANA)

II)  $\Psi_1(u) = A_1 u e^{-\frac{u^2}{2}}$  DISPARI      per  $d \uparrow u \uparrow$ , la particella è maggiormente confinata (parabola più ripida)

→ si MANTIENE ALTERNANZA PARI, DISPARI  
perché  $V(x)$  è SIMMETRICA

III)  $\Psi_2(u) = A_2 (1-u^2) e^{-\frac{u^2}{2}}$  PARI

IV)  $\Psi_3(u) = A_3 (3u-2u^3) e^{-\frac{u^2}{2}}$  DISPARI



Ciascuna di queste funzioni ha un  
autovettore associato

livelli di ENERGIA

$$E_m = \left(m + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega$$

$$\omega = \sqrt{\frac{\alpha}{m}}$$

$$E_2 = \frac{5}{2} \hbar \omega$$

$$E_1 = \frac{3}{2} \hbar \omega$$

$$E_0 = \hbar \omega$$

CRESCSE LINEARMENTE

con  $m$  è una  
quadratamente  
come nella

CONANCHE  
INFISICA  
CLASSICA

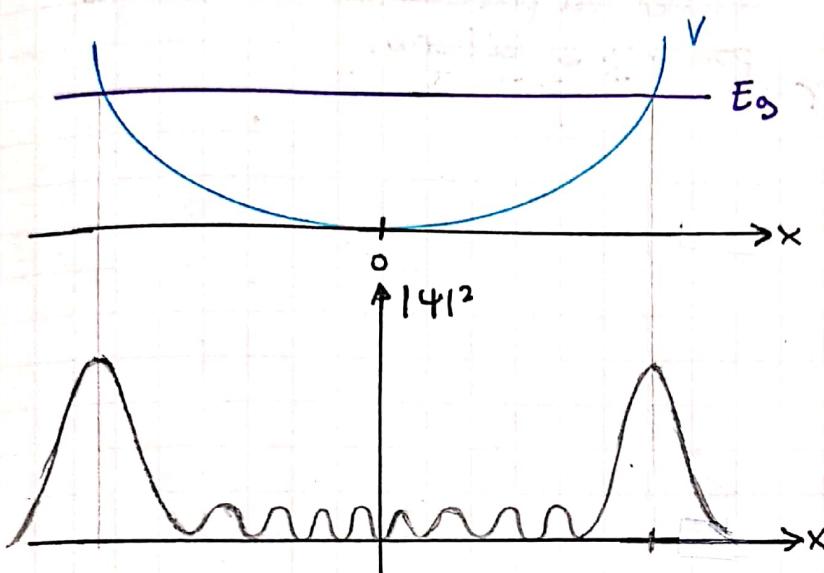
ENERGIA DI  
PUNTO ZERO

$\Psi_2$

$\Psi_1$

$\Psi_0$

aumentando  $m$  e dunque è l'energia della particella, la particella si allontana sempre di più dal punto di equilibrio statico (basta osservare  $|V|^2$ ). La probabilità di trovare la particella all'esterno della buca aumenta con l'energia. Ad esempio con  $m=9$



La massima probabilità di trovare la particella è proprio nei punti spaziali di intersezione tra il livello energetico della particella e il potenziale parabolico.

La particella quantistica non rispetta i vincoli della fisica classica, dato che questa può estendere il suo moto anche oltre quei punti dove classicamente l'energia cinetica sarebbe nulla.

Troviamo perciò riscontro con la fisica classica in quanto la particella passa molto tempo (e' più probabile trovarla) laddove classicamente avviene l'inversione di moto (del pendolo). In questi punti, nell'analogia classico del pendolo, la massa passa più tempo perché la velocità rallenta fino ad annullarsi completamente. È lo stesso per la particella quantistica.

→ A livelli di energia maggiori il comportamento diventa molto più classico e meno quantistico.

Scrivendo l'eq. di Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi + V\Psi = E\Psi$$

Nei punti di intersezione, ovvero dove  $V=E$  i due termini si elidono e la derivata seconda si annulla

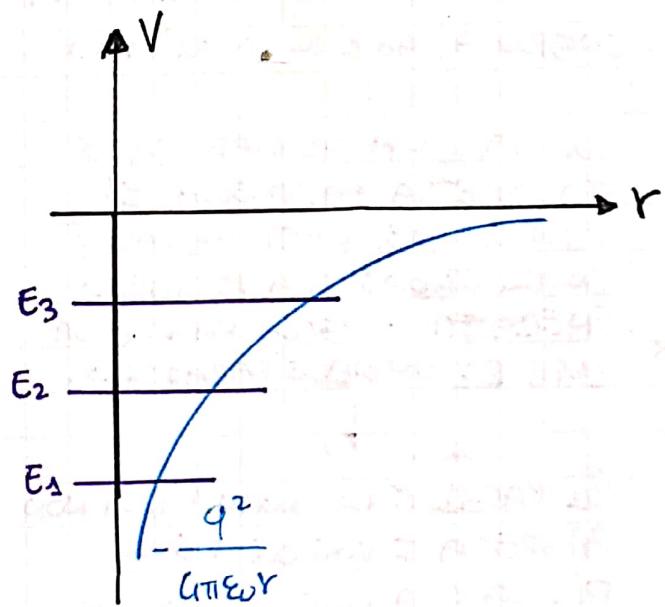
$$\frac{d^2}{dx^2} \Psi = 0$$

Ovvero l'autofruzione presenta un punto di flesso.

⇒ Abbiamo terminato quasi tutte le 'buche di potenziale' con soluzioni analitiche. Le ultime sono la BUCA TRIANGOLARE e la BUCA COORNBIANA TRIDIMENSIONALE (atomo di idrogeno) i cui livelli energetici sono

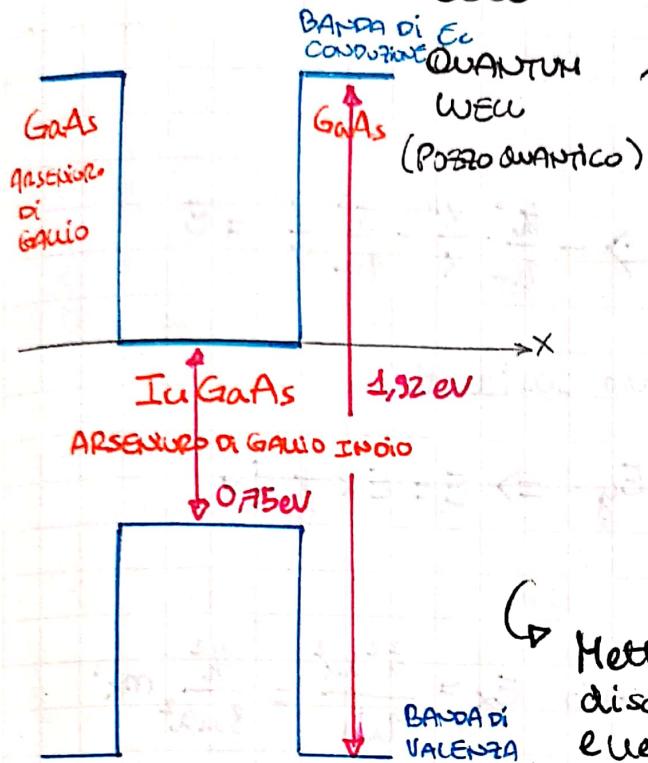
$$E_m = -\frac{Ry}{m^2} \quad \text{con Ry: cost. di HYDREGEN}$$

Se osserviamo l'aumento del POTENZIALE generato dal PROTONE che intrappa l'elettrone, al variare della distanza radiale  $r$  dal protone stesso:

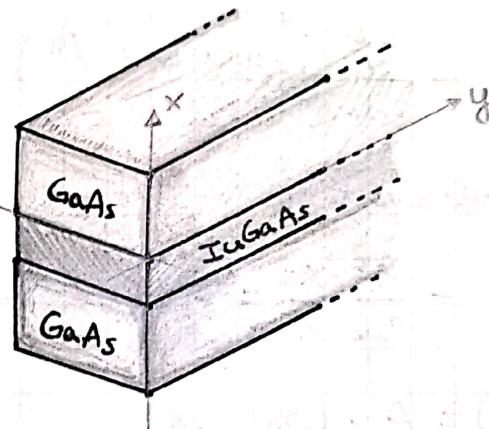


gli autosalvi. Egli sono negativi perché la particella con energia positiva si libera.

# POTENZIALI BIDIMENSIONALI



→ MODELLIZZAZIONE STUDIATA IN MICROELETTRONICA  
PER LA COMBINAZIONE DI MATERIALI CON DIVERSO BANDGAP.

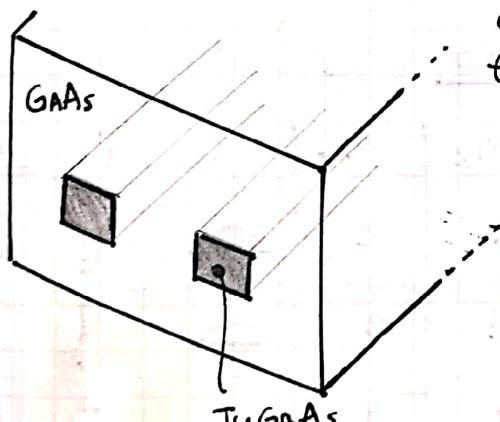


→ Mettendo insieme i due materiali abbiamo una discontinuità nella banda di conduzione Ec e nella banda di valenza Ev

## II: BANDGAP

gli autovalori (energie) sono dettati proprio dalla teoria studiata più qui.

Il configuramento potrebbe però andare in 2 dimensioni, con le quantum wire (gilo) interessante per la microelettronica. Tale struttura con i due materiali potrebbe rappresentare i transistor del futuro.



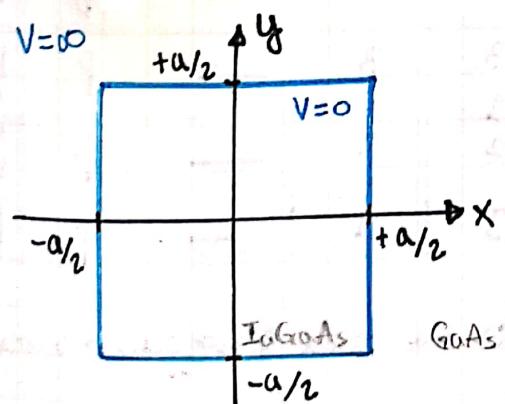
Le confinamenti avvieni in due dimensioni  
Qual è l'autofunzione nel quantum wire?

all'interno del quadrato (**I<sub>u</sub>GaAs**) assumiamo  
POTENZIALE zero per semplicità.  
fuori (**GaAs**) POTENZIALE INFINTO.

L'EQUAZIONE DI SCHÖDINGER PIENTA

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \Psi(x,y) = E \Psi(x,y)$$

(all'interno. All'estero sarà nulla  
perché come nel caso monodimensionale  
 $V=\infty$ )



Possiamo risolvere l'eq. di schrödinger in questo caso particolare, per separazione di variabili:

$$\psi(x,y) = x(\times) y(y)$$

l'es. diventa:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(x''y + xy'') = EXY \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{x''}{x} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{y''}{y} = E$$

una soluzione soltanto se sia  $x$  che  $y$  sono costanti

$$-\frac{f\hbar^2}{2m} \frac{x''}{x} = Ex \quad \text{and} \quad -\frac{f\hbar^2}{2m} \frac{y''}{y} = Ey \Rightarrow E = Ex + Ey$$

$$x(x) = A_x \cos(k_x x)$$

$$= B_x \sin(k_x x) \text{ con } k_x \text{ quantizzata} \quad E_x = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{8ma^2} m_x^2$$

$$y(y) = A_y \cos(\kappa_y y)$$

$$\therefore B_y \sin(k_y y) \text{ con } k_y \text{ quantizzata. } E_y = \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{8ma^2} m_y^2$$

(vale ancora l'alteranza funzionale pari/dispari in base ai numeri quantici  $m_x$  e  $m_y$ , che determinano anche il numero di elettri)

Então  $\Psi(x,y) = x(x)y(y)$  exemplo

$$E = \frac{h^2}{8\pi a^2} (m_x^2 + m_y^2)$$

## COEFF. DI DEGENERACAO

$$g = 2$$

STATI  
DEGENERATI  
PARLI ENERGIA

I BOX ci dicono tramite i dati  
la probabilità di trovare l'elettrone  
lungo la sezione

18

una possibile includere un'elenco di:

anche l'asse z dove la particella è descritta da una funzione d'onda di moto libero della particella stessa.

↳ LA SORRIORE WINGO CLASSE 7 E' ELONDA PIANA !

$E / \frac{h^2}{8m\omega^2}$	$M_x$	$M_y$	$x$	$y$	$xy$
$1^2 + 1^2 = 2$	1	1			
5	1	2			
5	2	1			
8	2	2			
10	1	3			
10	3	1			

La funzione complessiva diventa per il quantum wire;

$$\Psi(x, y, z) = X(x) Y(y) \cdot e^{ik_z z} \quad \text{con } E = E_x + E_y + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$$

$$\Psi(x, y, z, t) = X(x) Y(y) e^{i(k_z z - \omega t)} \quad \text{con } \omega = \frac{E}{\hbar}$$

l'elettrone si muove (e' libero) lungo una direzione. Ie confinamento DEL QUANTUM WIRE e' 1D.

Per la quantum well i.e. confinamento e' 2D (l'elettrone e' libero di muoversi in due dimensioni).

$$\Psi(x, y, z) = \begin{pmatrix} A \cos(k_x x) \\ B \sin(k_x x) \end{pmatrix} e^{i(k_y y + k_z z)}$$

$$\Psi(x, y, z, t) = X(x) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \quad \text{con } \vec{k}, \vec{r} \text{ e' piano} \quad \left| \omega = \frac{E}{\hbar} \right. \text{(vettori)}$$

esiste anche un caso 0-DIMENSIONALE (particella totalmente confinata lungo le tre direzioni). E' il caso del quantum dot

$$\Psi = X(x) Y(y) Z(z)$$



con applicazioni in optoelettronica, quantum computing, etc...

# RIEPILOGO DEI POTENZIALI e EQ. DI SCHRÖDINGER

STATI CONFINATI  $\rightarrow$  set discreto di autovalori e autogranziali

(energia della particella ha intersezioni con il potenziale all'infinito)

STATI NON CONFINATI  $\rightarrow$  set continuo di autovalori e autogranziali (no intersezioni energia-potenziale all'infinito)

## FUNZIONI D'ONDA LIBERA

- ONDA VIAGGIANTE VERSO X CRESCENTI:

$$\Psi(x,t) = \Psi(x) e^{-i\omega t} = e^{i(kx - \omega t)}$$

- ONDA VIAGGIANTE VERSO X CRESCENTI e DECRESCENTI:

PARI AMPIEZZA  $\Psi(x,t) = e^{i(kx - \omega t)} + e^{i(-kx - \omega t)}$

DIVERSA AMPIEZZA  $\Psi(x,t) = (2e^{ikx} - e^{-ikx}) e^{-i\omega t}$

\* NOTA: l'onda è STAZIONARIA

$$|\Psi(x,t)|^2 = |\Psi(x)|^2$$

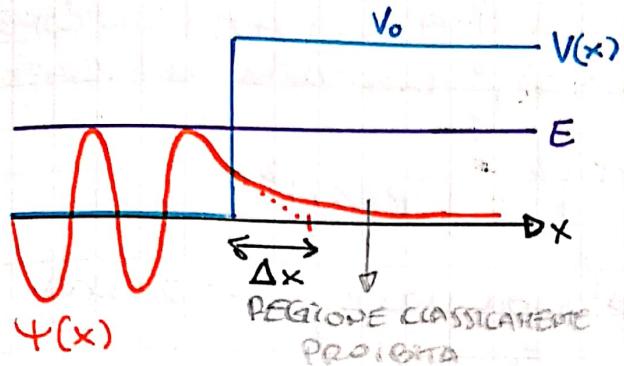
per la particella libera si sempre costante

$\rightarrow$  posizione completamente indeterminata

$\rightarrow$  momento perfettamente determinato

$$p = \hbar k$$

## GRADINO DI POTENZIALE.



$E < V_0$

$$x < 0 \quad \Psi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$$

$$x > 0 \quad \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) = \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E) \Psi(x)$$



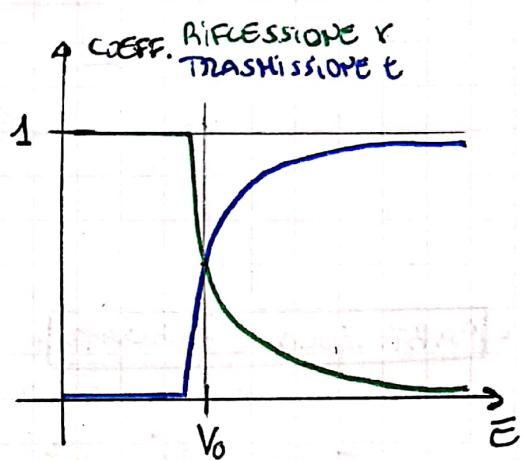
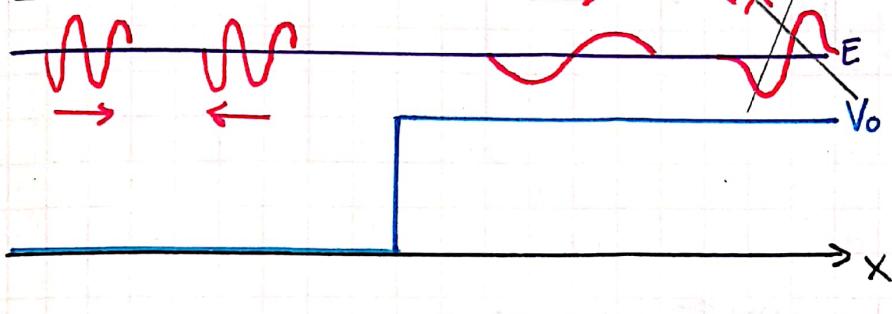
$$\Psi(x) = C e^{dx} + D e^{-dx}$$

con

$$d = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$$

hanno l'esponentiale crescente per  $x > 0$  deve essere scartato perché non ha senso fisicamente ( $\Psi \rightarrow \infty$  per  $x \rightarrow \infty$ )  $\Rightarrow C = 0$

$E > V_0$



$E < V_0$

$$\Psi(x < 0) = \frac{k + id}{2k} D e^{i(kx - wt)} + \frac{k - id}{2k} D e^{-i(kx + wt)}$$

$$\Psi(x > 0) = D e^{-dx} e^{-iwt} \quad (\text{STAZIONARITÀ!})$$

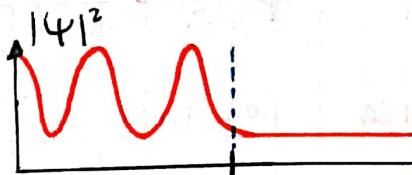
$E > V_0$

$$\Psi(x < 0) = A e^{i(kx - wt)} + \frac{k - k'}{k + k'} A e^{-i(kx + wt)}$$

$$\Psi(x > 0) = \frac{2k}{k + k'} A e^{i(k'x - wt)} \quad \leftarrow \begin{array}{l} \text{ONDA PIANA} \\ \text{VIAGGIANTE} \end{array}$$

(dato che  $k = 2\pi/\lambda \Rightarrow k > k'$ ,  $\lambda < \lambda'$ ;  $A$  ONDA PIÙ CENTRA meno  $E_n$ )

GRADINO NEGATIVO



SONO TUTTI STATI STAZIONARI

Cioè ciò implica che le  $\Psi$  siano stazionarie.

## • STATI NON STAZIONARI

Una funzione d'onda costruita con UNA SOLO AUTOFUNZIONE e' STAZIONARIA, cioè la  $|\Psi(x,t)|^2$  non varia nel tempo.

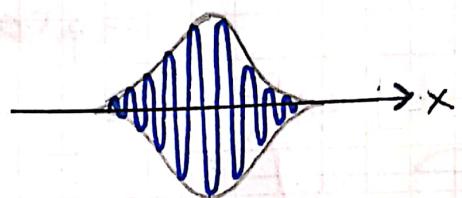
Inoltre:

$$|\Psi(x,t)|^2 = |\Psi(x)e^{-i\omega t}|^2 = |\Psi(x)|^2$$

ma in generale una funzione d'onda non è stazionaria

$$\Psi(x,t) = \sum_n a_n \Psi_n(x) e^{-i \frac{\epsilon_n}{\hbar} t}$$

→ esempio: PACCHETTO D'ONDA



## • PARTICELLA CONFINATA

$$E_n = \frac{\hbar^2}{8m} n^2 \quad n: \text{numero quantico}$$

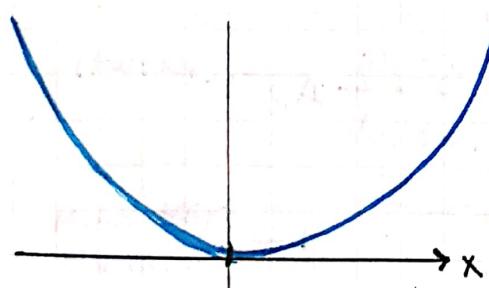
LIVELLI ENERGETICI

$$\hookrightarrow \text{DISPARI } \Psi(x) = A_n \cos(k_n x)$$

$$\text{PAIRI } \Psi(x) = B_n \sin(k_n x)$$

( $|\Psi(x,t)|^2$  'costante', STAZIONARIO)

## • OSCILLATORE ARMONICO



I punti di flesto esterni delle soluzioni ai vari livelli energetici tracciano proprio una parabola che segue l'andamento del potenziale  $V(x)$

$V(x)$  anche qui soluzioni PARI e DISPARI

$$E_n = \hbar \nu (n + \gamma/2) \quad \nu = \frac{w}{2\pi} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{dV}{dx}}$$

$$\Psi_0(x) = A_0 e^{-u^2/2}$$

$$\Psi_1(x) = A_1 u e^{-u^2/2}$$

$$\Psi_2(x) = A_2 (1 - 2u^2) e^{-u^2/2}$$

$$\Psi_3(x) = A_3 (3u - 2u^3) e^{-u^2/2}$$

$$\text{con } u = x \sqrt{\frac{du}{\hbar^2}}$$

# COPPIA DI BUCHE DI POTENZIALE

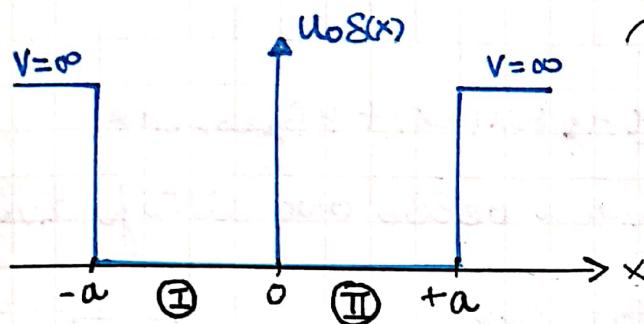
Che puo' essere inteso come il modello di una MOLECOLA di DUE ATOMI

Ci sono 5 regioni, con 4 confini  
con 3 condizioni al contorno.



Molto complicato!

Proviamo a riformulare il problema  
sfruttando un delta di Dirac



$\delta(x)$  infinita in 0 con  
integrale uguale a 1

→ dato che  $\int U_0 \delta(x) dx = U_0$

possiamo ricadurlo a un  
rettangolo di base e altezza  
tali che l'integrale sia  $U_0$

↳ riduciamo il problema  
a sole due zone (e due  
bucche con potenziale  
uovo)

Risolvendo l'equazione di Schrödinger nelle due zone

$$\textcircled{I} \quad \Psi_1(x) = A_1 \cos(kx) + B_1 \sin(kx)$$

$$\text{con } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$\textcircled{II} \quad \Psi_2(x) = A_2 \cos(kx) + B_2 \sin(kx)$$

per SIMMETRIA  $V(x)$  le funzioni d'onda  $\Psi(x)$  saranno o  
pari o dispari, in modo alternato.  
Distinguiamo i casi per semplicità.

AUTOFUNZIONE  
PARI

$$\text{deve valere } \Psi_1(0) = \Psi_2(0) \Rightarrow A_1 = A_2 = A$$

CONDIZIONE DI  
CONTINUITÀ  
AL CONTORNO

$$\Psi_1(-x) = \Psi_2(x) \Rightarrow -B_1 = B_2 = B$$

CONDIZIONE DI  
PARITÀ DELLA  
AUTOFUNZIONE

La derivata non deve essere necessariamente continua dato che il potenziale è infinito

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + u_0 \delta(x) \right) \Psi(x) = E \Psi(x)$$

$$\Rightarrow - \int_{0^-}^{0^+} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi dx + \int_{0^-}^{0^+} u_0 \delta(x) \Psi dx = \int_{0^-}^{0^+} E \Psi dx$$

$$\Rightarrow - \frac{\hbar^2}{2m} [\Psi'(0^+) - \Psi'(0^-)] + u_0 \Psi(0) = - \frac{\hbar^2}{2m} (k_B^2 - k_B^2) + u_0 A = 0$$

$$\Rightarrow A = \frac{\hbar^2 k}{m u_0} B$$

(condizione di discontinuità)

dove abbiamo usato  $\Psi_i'(x) = -k A_i \sin(kx) + k B_i \cos(kx)$

Ottendiamo un'espressione chiusa delle due autofunzioni

caso PARI

$$\begin{cases} \Psi_1(x) = B \frac{\hbar^2 k}{m u_0} \cos(kx) - B \sin(kx) \\ \Psi_2(x) = B \frac{\hbar^2 k}{m u_0} \cos(kx) + B \sin(kx) \end{cases}$$

$$\cos k = \frac{\sqrt{mE}}{\hbar}$$

ottenibile per condizione di normalizzazione

$$\frac{\hbar^2 k}{m u_0} \cos(ka) + \sin(ka) = 0$$

$$\Rightarrow \tan(ka) = - \frac{\hbar^2 k}{m u_0}$$

AUTOVALORI PARI

↳ DISCRETIZZAZIONE DEI VALORI DI  $k$  e dunque  
LIVELLI ENERGETICI DISCRETI  
(ottenibili per metodo grafico)

### AUTOFUNZIONE DISPARI

Condizione di continuità

$$\Psi_1(0) = \Psi_2(0) \Rightarrow A_1 = A_2 = A$$

Condizione di Autofunzione Dispari

$$-\Psi_1(x) = \Psi_2(x) \Rightarrow$$

$$-A_1 \cos(kx) + B_1 \sin(kx) = A_2 \cos(kx) + B_2 \sin(kx)$$

$$\Rightarrow A = 0; B_1 = B_2 = B$$

nuova condizione

CONDIZIONE DI DISCONTINUITÀ

→ CONDIZIONE SULLA DERIVATA PRIMA IDENTICAMENTE VERIFICATA

$$-\int_{0^-}^{0^+} \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2}{dx^2} \Psi dx + \int_{0^-}^{0^+} u_0 \delta(x) \Psi dx = \int_{0^-}^{0^+} E \Psi dx$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} [\Psi'(0^+) - \Psi'(0^-)] + u_0 \Psi(0) = -\frac{\hbar^2}{2m} (KB_2 - KB_1) + u_0 A = 0$$

con l'autofunzione esprimibile in forma chiusa:

$$\Psi_1(x) = \Psi_2(x) = B \sin(k_n x) \quad ) \text{ DISPARI} \Rightarrow \tan(k_n a) = 0$$

e AUTOVALORI (livelli energetici) ottenibile dalla CONDIZIONE DI APPROXIMAMENTO A BORDO BUCÀ

$$\sin(k_n a) = 0 \Rightarrow k_n = n \frac{\pi}{a}$$

AUTOVALORI DISPARI

ANOTA: persiste l'alternanza degli autovalori PARI e DISPARI

per  $u_0 \rightarrow 0$   $\tan(k_n a) \rightarrow \infty$  per AUTOVALORI PARI;  $k_n \approx \frac{(2n+1)\pi}{2a}$

(retta  $-\frac{\hbar^2}{mu_0} k_n$  molto pendente verso il basso)

per AUTOVALORI DISPARI  $k_n = \frac{2n\pi}{2a}$

$$k_n = n \frac{\pi}{2a} \quad E_n = \frac{\hbar^2}{8m(2a)^2} n^2 \quad \text{AUTOVALORI PER } u \rightarrow 0$$

Se  $u_0 \rightarrow 0$  è come se la barriera centrale non ci fosse; si ricorda nel caso di una buca di potenziale di larghezza  $2a$ , e infatti l'espressione dell'energia coincide con quella della buca singola ( $u_0 \approx 10^{-30} \text{ Jm}$ )

è detta condizione di FORTE ACCOPPIAMENTO tra le buche, con la barriera centrale che praticamente scompare e gli elettroni che tunnelano facilmente

per  $u_0 \rightarrow \infty$  per AUTOVALORI PARI  $\tan(k_n a) \rightarrow 0$

AUTOVALORI PARI E DISPARI tendono a coincidere

(retta  $-(\hbar^2/mu_0) k_n$  poco pendente) → BUCHE INDEPENDENTI

è detta  
condizione di  
DEBOLE  
ACCOPPIAMENTO  
( $u_0 \approx 10^{-20} \text{ Jm}$ )

$$k_n = 2n \frac{\pi}{2a} \quad E_n \approx \frac{\hbar^2}{8ma^2} n^2$$

AUTOVALORI PER  $u_0 \rightarrow \infty$

diventano gli autovalori della BUCHE SINGOLA. Le due buche diventano singole perché in mezzo la barriera diventa infinita

\* NOTA: L'autofunzione complessiva descrive la particella in tutto il senso di ESISTENZA della stessa.

Dalle due autofunzioni trovate sembrerebbe che la particella coesista in entrambe le buche simultaneamente.

Situazione paradossale che non ha intesa puramente come POSIZIONE DELLA PARTICELLA, ma come PROBABILITÀ DI TROVARLA.

(EQUIPROBABILITÀ DI TROVARE LA PARTICELLA A DESTRA E SINISTRA)

Se volessimo descrivere con maggiore precisione il TRASPORTO DELLA PARTICELLA ATTRAVERSO LE DUE BUCHE (avendo trovare una sorta di PACCHETTO D'ONDA come avevamo fatto per la PARTICELLA LIBERA):

↳ possiamo combinare DUE STATI ADIACENTI (i due a MINORE ENERGIA) e formare un PACCHETTO. (anche se si sovrappone un'infininità di onde)

$$\Psi(x,t) = \underbrace{a_{1p}\Psi_{1p}(x)e^{-i\frac{E_{1p}}{\hbar}t}}_{\text{AUTOFUNZIONE PARI}} + \underbrace{a_{1d}\Psi_{1d}(x)e^{-i\frac{E_{1d}}{\hbar}t}}_{\text{AUTOFUNZIONE DISPARI}}$$

$$|\Psi(x,t)|^2 = \left| e^{-i\frac{E_{1p}}{\hbar}t} a_{1p}\Psi_{1p}(x) + e^{-i\frac{E_{1d}}{\hbar}t} a_{1d}\Psi_{1d}(x) \right|^2$$

$= 1$

DIFFERENZA ENERGETICA (SPLITTING)

E AUTOVAL. → E AUTOVAL.  
DI dispari PARI  
(di poco)

è cioè una somma tra vettori nel dominio dei fasori.

↳ stimando si può notare che  $|\Psi(x,t)|^2$

presenta un massimo che oscilla tra le due buche e che di fatto ci conferma un movimento della particella tra una buca e l'altra.

↳ ciò è visibile solo osservando lo STATO NON STAZIONARIO. Osservando gli autostati singolarmente non otteniamo questa condizione.

(i singoli autostati sono STAZIONARI!)

⇒ la frequenza di oscillazione delle elettrone tra i due buchi è osservabile dai termini di fase con le due energie.

PER ANGOLARE  
 $\rightarrow \frac{\Delta E}{\hbar}$

Inoltre per gli autostati si ha il livello di energia e' ben definito (senza indeterminazione)

Per lo stato coni stazionario No, e si deve invece parlare di VALORE DI ASPETTAZIONE DELL'ENERGIA  $\langle E \rangle$

$$\begin{aligned}\langle E \rangle &= \int \Psi^*(x,t) i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x,t) dx \\ &= \int (|\alpha_{1p}|^2 |\Psi_{1p}|^2 \bar{E}_{1p} + |\alpha_{1d}|^2 |\Psi_{1d}|^2 \bar{E}_{1d}) dx \\ &= |\alpha_{1p}|^2 \bar{E}_{1p} + |\alpha_{1d}|^2 \bar{E}_{1d}\end{aligned}$$

) SOMMA (MEDIA) PESATA DEI  
VALORI ENERGETICI PESATI  
PER LA PROBABILITA' DI  
DI SPETTRO AUTOSTATO

\* NOTA: uno splitting alto  $\Delta \bar{E}_{12}$  si ha per una piccola barriera tra le due buche.

Se la barriera e' piccola l'elettrone effettuerà con più facilità tunneling e si muoverà dunque più facilmente tra le due buche, e quindi anche più velocemente (meno tempo, frequenza maggiore)

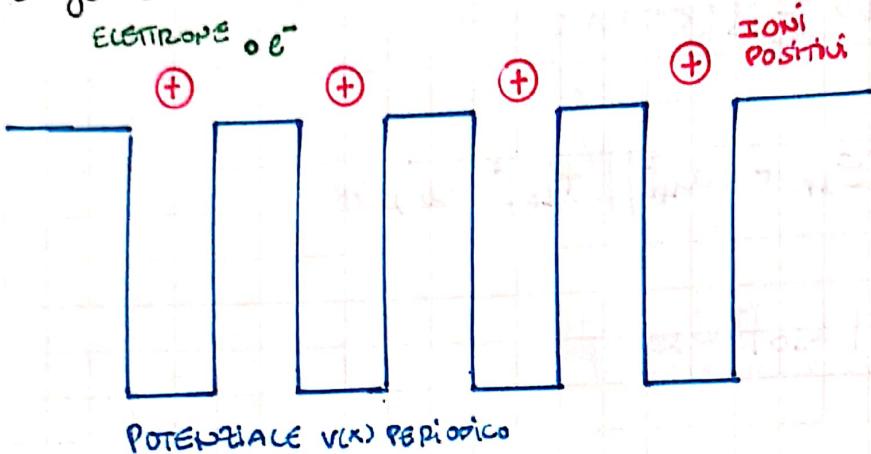
$$\Delta \bar{E}_{12} \propto f = \frac{\Delta \bar{E}_{12}}{\hbar}$$

(e viceversa!)

↳ Questa affermazione vale anche trasferita alle BANDE DELLO STATO SOLIDO. Maggiore sarà l'ampiezza della banda  $\Delta \bar{E}_{12}$  minore sarà la difficoltà con cui la particella vi si muove (MASSA EFFICACE, MOBILITÀ)

# TEORIA DELLE BANDE

Il problema fondamentale era comprendere il movimento degli elettroni in un reticolo cristallino.



Ora dobbiamo determinare lo STATO e IL TRASPORTO DEI PORTATORI (ELETTRONI) nel reticolo.

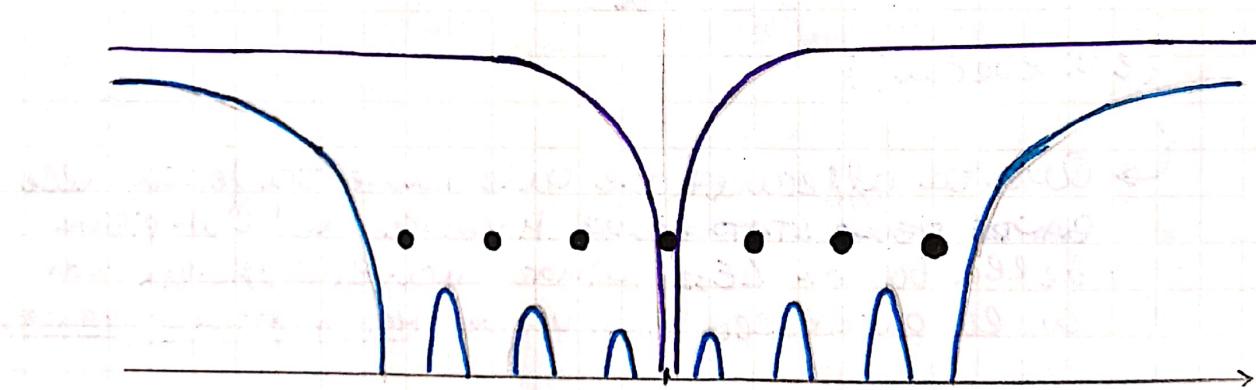


Dovremo risolvere la EQUAZIONE DI SCHröDINGER

## RETICOLI DI BUCHE DI POTENZIALE

Partiamo da un presupposto che lo stesso di potenziale periodico in figura è una MODELIZZAZIONE DELLA REALTÀ, data la sua MONODIMENSIONALITÀ e la FORMA DI POTENZIALE SCELTA.

Supponiamo infatti 7 atomi equamente distanziati



Ognuno di questi atomi è il CENTRO DI UN POTENZIALE COULOMBIANO con il suo andamento  $1/r$  (in viola su figura quello dell'atomo centrale).

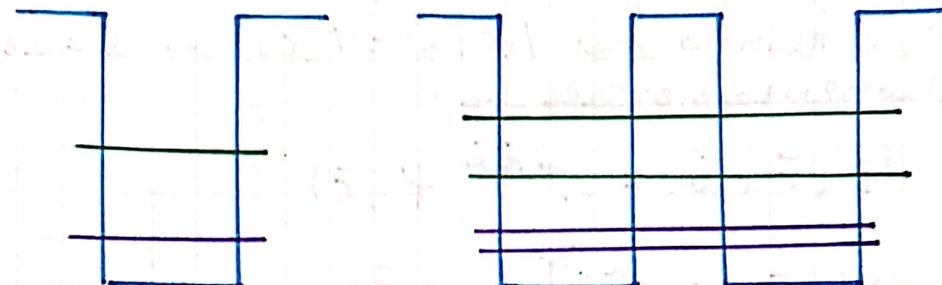
In celeste la SOMMA di tutti questi POTENZIALI COULOMBIANI

Ottieniamo via 'LA GRANSA SCATOLA ESTERNA' di POTENZIALE (barriera di potenziale più alta). Si tratta della FUNZIONE LAVORO necessaria per strappare l'elettrone al cristallo.

All'interno vediamo invece con periodicità buche e barriere che si alternano di cui la figura appunto è una modellizzazione.

## COSA CI ASPETTIAMO DI TROVARE?

Abbiamo visto che passando da una buca a due buche uguali tra loro si ottengono dei DOPPIETRI DI AUTOVALORI, uno per ognì AUTOVALORE della BUCA SINGOLA, anziché singoli AUTOVALORI INDIPIENDENTI tra loro.



\*NOTA: più le buche sono indipendenti tra loro ( $N \rightarrow \infty$ ) più  $\Delta E_{\text{gg}}$  SPANNING diminuisce e gli autovalori tendono a coincidere con quelli della singola buca.

A energie maggiori il tunneling è più probabile, le buche sono più dipendenti tra loro,  $\Delta E_{\text{gg}} \uparrow$  ( $\Delta E_{\text{gg}} \propto E$ )

Con tre buche accoppiate troveremo dei terzetti, con cinque dei quintetti di autovalori tutti raggruppati attorno al valore della singola buca.

Con  $N$  buche, con  $N$  numero grande otteniamo un gruppo di  $N$  livelli che determinano dunque una BANDA ENERGETICA (con valori pressoché continui) centrata sull'autovalore della singola buca.

Osserviamo delle descrizioni matematiche di tali bande. Ma prima... le proprietà generali di un elettrone in un potenziale periodico:

### TEOREMA DI BLOCH

SE  $V(x)$  È PERIODICO CIOÈ  $V(x+a) = V(x)$  (con  $a$  PASSO RETICOLARE)

ALLORA L'AUTOFUNZIONE DELL'ELETTRONE È TALE CHE

$$\Psi(x+a) = e^{ikax} \Psi(x)$$

QUESTA AUTOFUNZIONE È PERIODICA A MENO DI UN FATTORIO DI FASE.

(IL MODULO È COSTANTE)

QUESTO È EQUIVALENTE A DIRE CHE

$$\Psi(x) = e^{ikx} u_k(x)$$

Dove  $u_k(x)$  È UN'AUTOFUNZIONE (FONDAZIONE DI BLOCH) PERIODICA CON PERIODICITÀ  $a$   $u_k(x+a) = u_k(x)$

MOLTIPLICATA UN'ONDA PIANA  $e^{ikx}$ . A PARTE LA  $u_k(x)$  STIAMO DICENDO CHE L'AUTOFUNZIONE DI UN ELETTRONE ALL'INTERNO DEL RETICOLARE È ANCHE DI UN'ONDA PIANA, QUINDI UN ELETTRONE LIBERO.

SOPRATTUTTO ASSUMEREMO LA  $u_k(x)$ .

LE DUE FORMULAZIONI SONO EQUIVALENTE:

$$\Psi(x+a) = e^{ikx} e^{ika} u_n(x+a) = e^{ikx} e^{ika} u_n(x) = \Psi(x) e^{ika}$$

### TEOREMA DI BLOCH IN 3D

Se  $V(r)$  è periodico cioè  $V(r+a) = V(r)$  con  $a = a_1 + a_2 + a_3$  allora l'autofunzione è tale che

$$\cdot \Psi(\bar{r} + \bar{a}) = e^{i\bar{k}\bar{a}} \Psi(\bar{r})$$

$$\Psi(\bar{r}) = e^{i\bar{k}\bar{r}} u_{\bar{k}}(\bar{r})$$

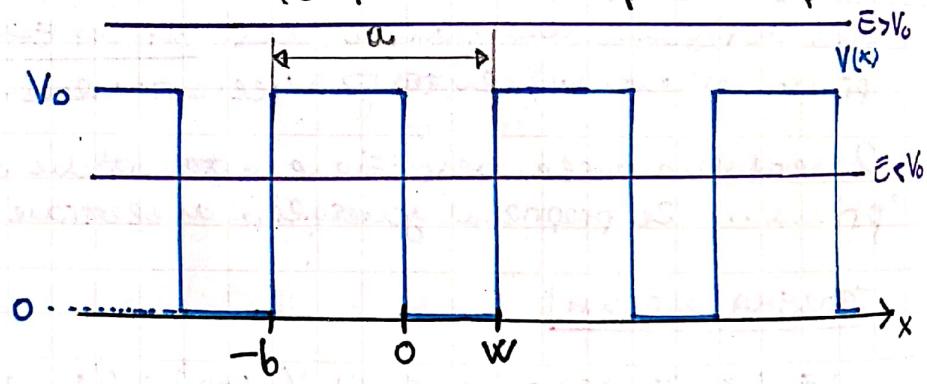
\*NOTA: Spediamoci di un passo reticolare a la autofunzione ripete se stessa a meno di un fattore di fase  $e^{ika}$  che la ruota di un angolo tra ogni  $a$ .

Il Modulo È Periodico.

### MODELLO DI KRONIG-PENNEY

Analizziamo matematicamente il potenziale periodico più semplice:

Le equazioni di Schrödinger  
in corrispondenza  
della buca (Well)



$$0 < x < w$$

$$\frac{d^2}{dx^2} \Psi_w + q^2 \Psi_w = 0 \quad \text{con} \quad q = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad \left. \begin{array}{l} \text{è una semplice} \\ \text{riformulazione} \\ \text{degli Eq. di Schrödinger} \\ (\text{con } V=0) \end{array} \right)$$

$$-b < x < 0$$

$$\frac{d^2}{dx^2} \Psi_b + \beta^2 \Psi_b = 0 \quad \text{con} \quad \left. \begin{array}{l} \circ) E < V_0 \quad \beta = i\beta_- = i\frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar} \\ \circ) E > V_0 \quad \beta = \beta_+ = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar} \end{array} \right)$$

Risolvendo:

$$\Psi_w(x) = A_w \sin(\alpha x) + B_w \cos(\alpha x)$$

$$\Psi_b(x) = A_b \sin(\beta x) + B_b \cos(\beta x)$$

PRIMA BUCA

↑  
PRIMA  
BARRIERA

→ solo per ee  
due buca/barriera  
vicine aeo zero!  
(vicina tra buca? cambiano  
i creppi!)

le condizioni al contorno sono:

$$\begin{cases} \Psi_b(0) = \Psi_w(0) \\ \frac{d\Psi_b}{dx}\Big|_0 = \frac{d\Psi_w}{dx}\Big|_0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} B_b = B_w \\ \beta A_b = \alpha A_w \end{cases}$$

cerchiamo altre due condizioni:

dal TEOREMA DI BLOCH:

$$\begin{cases} \Psi_w(w) = \Psi_b(-b) e^{ik(w+b)} \\ \frac{d\Psi_w}{dx}\Big|_w = \frac{d\Psi_b}{dx}\Big|_{-b} e^{ik(w+b)} \end{cases}$$

con  $a = w+b$

per ora resta un parametro  
geometrico  
(da cosa dipende?)

da cui

$$\begin{cases} A_w \sin(\alpha w) + B_w \cos(\alpha w) = (-A_b \sin(\beta b) + B_b \cos(\beta b)) e^{ika} \\ \alpha A_w \cos(\alpha w) - \alpha B_w \sin(\alpha w) = (\beta A_b \cos(\beta b) + B_b \sin(\beta b)) e^{ika} \end{cases}$$

Sostituendo e muendo le condizioni ottieniamo:

$$\begin{cases} A_w (\beta \sin \alpha w - \alpha e^{ika} \sin \beta b) + B_w (\beta \cos \alpha w - \beta e^{ika} \cos \beta b) = 0 \\ A_w (\alpha \cos \alpha w - \alpha e^{ika} \cos \beta b) + B_w (-\alpha \sin \alpha w - \beta e^{ika} \sin \beta b) = 0 \end{cases}$$

i cui autovettori si ottengono muovendo il determinante

$$\cos(ka) = \cos(\alpha w) \cdot \cos(\beta b) - \frac{\alpha^2 + \beta^2}{2\alpha\beta} \sin(\alpha w) \sin(\beta b)$$

(il SISTEMA ha soluzione sola se  $\det \neq 0$ )

mette in relazione il  $k$  con la

- GEOMETRIA DEL RETTANGO ( $w \times b$ )
- L'ENERGIA ( $\alpha \times \beta$ )

RELAZIONE DI DISPERSIONE

relazione  $k$  e energia

( $k$ : vettore d'onda della funzione incidente)

Definiamo orce

$$\alpha_0 = \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar} \quad \eta = \frac{E}{V_0} \leftarrow \text{energia normalizzata}$$

in modo da avere

$$\beta_+ = \alpha_0 \sqrt{\eta - 1}$$

$$\beta_- = \alpha_0 \sqrt{1 - \eta}$$

Ricordando che  $\cos(ix) = \cosh(x)$   
 $\sin(ix) = i \sinh(x)$

sostituendo ottieniamo

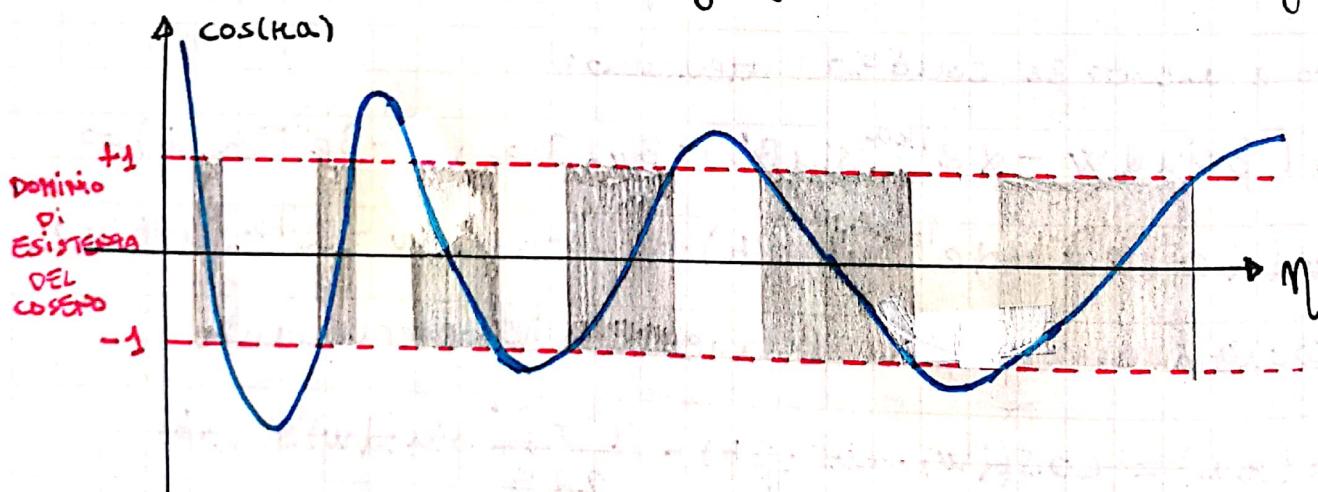
$$0 < \eta < 1 \quad (\text{sotto la BARRIERA})$$

$$\cos(ka) = \cos(\alpha_0 w \sqrt{\eta}) \cosh(\alpha_0 b \sqrt{1-\eta}) + \frac{1-2\eta}{2\sqrt{\eta(1-\eta)}} \sin(\alpha_0 w \sqrt{\eta}) \sinh(\alpha_0 b \sqrt{1-\eta})$$

$$\eta > 1 \quad (\text{sopra la BARRIERA})$$

$$\cos(ka) = \cos(\alpha_0 w \sqrt{\eta}) \cos(\alpha_0 b \sqrt{\eta-1}) - \frac{2\eta-1}{2\sqrt{\eta(\eta-1)}} \sin(\alpha_0 w \sqrt{\eta}) \sin(\alpha_0 b \sqrt{\eta-1})$$

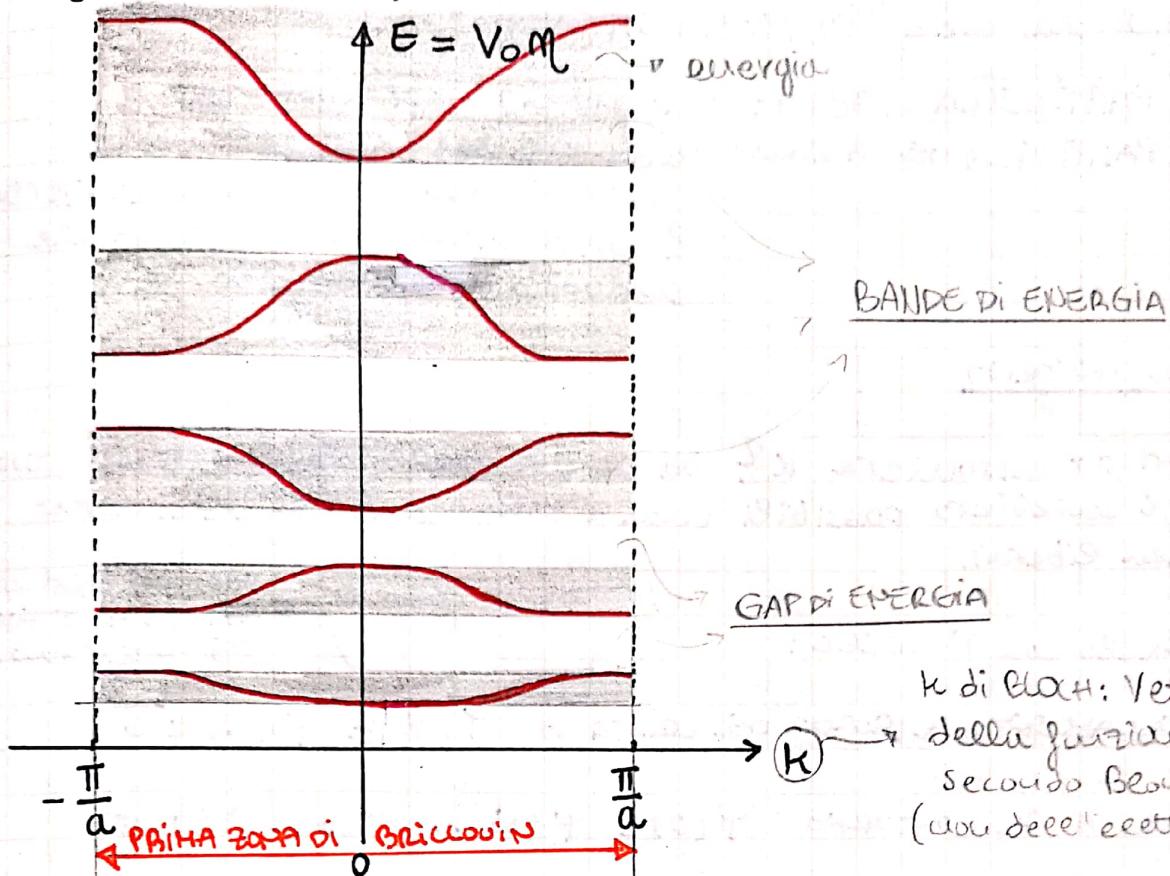
Le due equazioni si risolvono graficamente, ottieniamo infatti:



le REGIONI evidenziate sono le uniche in cui  $\eta$  e' valido e sono dette BANDE DI ENERGIA, separate da GAP DI ENERGIA.  
Nelle bande esistono degli autovalori, dei k e dunque degli stati (auto-  
guzioni).

Ae di fuori ci sono delle regioni proibite in cui non ci sono autofunzioni.

Trasformando in funzione di  $k$  e ENERGIA  $E$ :



$k$  di Bloch: Vettore d'onda  
della funzione d'onda  
secondo Bloch  
(non delle elettrone).

abbiamo informazioni sull'autovalore e il termine  $k$  dell'inviluppo della autofunzione.

Questa prende le forme di RAPPRESENTAZIONE DELLE BANDE.

In realtà il grafico potrebbe essere esteso fino a  $2\pi/a$  sull'asse  $k$ .  
La funzione assume dunque un andamento periodico su  $k$ .  
Limitandoci a  $\pm \pi/a$  prende le forme di RAPPRESENTAZIONE IN ZONA RIDOTTA, che è una semplificazione dato che la forma ESTESA non aggiungerebbe alcuna informazione data la periodicità ogni  $2\pi/a$ .

↳ Gli stati (autofunzioni) corrispondenti a  $\tilde{k}$  e  $\tilde{k} + m \frac{2\pi}{a}$  sono esattamente la stessa cosa a pari energia.

Inoltre:

$$\Psi_{\tilde{k}}(x) = \Psi_{\tilde{k} + 2m \frac{\pi}{a}}(x) \rightarrow u_{\tilde{k}}(x) e^{ikx} = u_{\tilde{k} + \frac{2\pi m}{a}}(x) \cdot e^{ikx} \cdot e^{i \frac{2\pi m}{a} x}$$

sono la stessa  
AUTOFUNZIONE

$$\Rightarrow u_{\tilde{k} + \frac{2\pi m}{a}}(x) = u_{\tilde{k}}(x) \cdot e^{-i \frac{2\pi m}{a} x}$$

↳ Rappresentare oltre  $\pm \pi/a$  non aggiungerebbe alcuna informazione (per tutti i livelli energetici)

Il BANDGAP, che nel modello nasce 'matematicamente', in realtà nasce fisicamente dalla TEORIA DELLE PERTURBAZIONI attorno a particolari valori di  $k$ , ovvero gli  $\pm m \frac{\pi}{a}$

↳ osservando le funzioni d'onda e le loro moduli quadri, per tutti i  $k$  e le bande energetiche, la probabilità di trovare la particella nella ceteranza buche/barriere è PERIODICA.

- \* NOTA:  $k$  ha due significati diversi per la particella libera e quindi due potenziali periodici.
- PARTICELLA LIBERA: momento dell'elettrone.
  - PARTICELLA NEL CRISTALLO: 'momento del cristallo' una costante del moto che incorpora l'interazione con il potenziale periodico del cristallo.

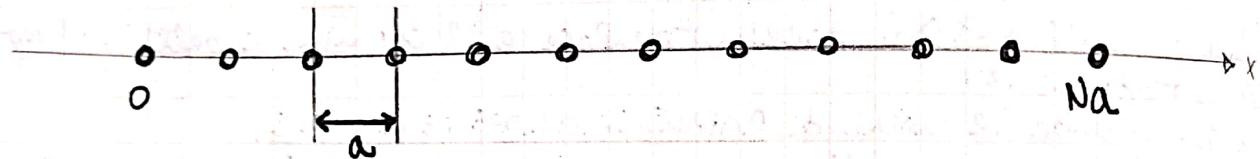
### CONDIZIONI AL CONTORNO

Quali valori può assumere  $k$ ? Se il cristallo fosse infinito, tutti i valori di  $k$  sarebbero possibili (non ci sono condizioni al contorno, vedi particella libera).

In un cristallo con  $N$  celle:

NESSUNA PARTICELLA ESISTE AL DI FUORI DEL CRISTALLO.

- ANNULLAMENTO AL BORDO DEL CRISTALLO  $\Psi(0) = \Psi(L) = 0$
- PERIODICITÀ AL CONTORNO  $\Psi(0) = \Psi(Na)$  → la più usata



→ AUTOFUNZIONE GENERICA  
nel cristallo:

$$\Psi(x) = u_k(x) e^{ikx}$$

$$\Psi(Na) = \Psi(0)$$

applico la  
condizione  
periodica al  
contorno

$$u_k(Na) e^{ikNa} = u_k(0)$$

$$\Rightarrow e^{ikNa} = 1$$

Che è soddisfatta per

$$k = \pm \frac{2\pi m}{Na} \text{ con } m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \frac{N}{2}$$

abbiamo in tutto  $N$  stati nella prima zona di Brillouin.

$$k = \pm \frac{\pi}{a}$$

Multipli di  $N$  stati si  
ottengono grazie alle  
moltipli bande  $\pm$

i  $k$  hanno VALORI DISCRETI

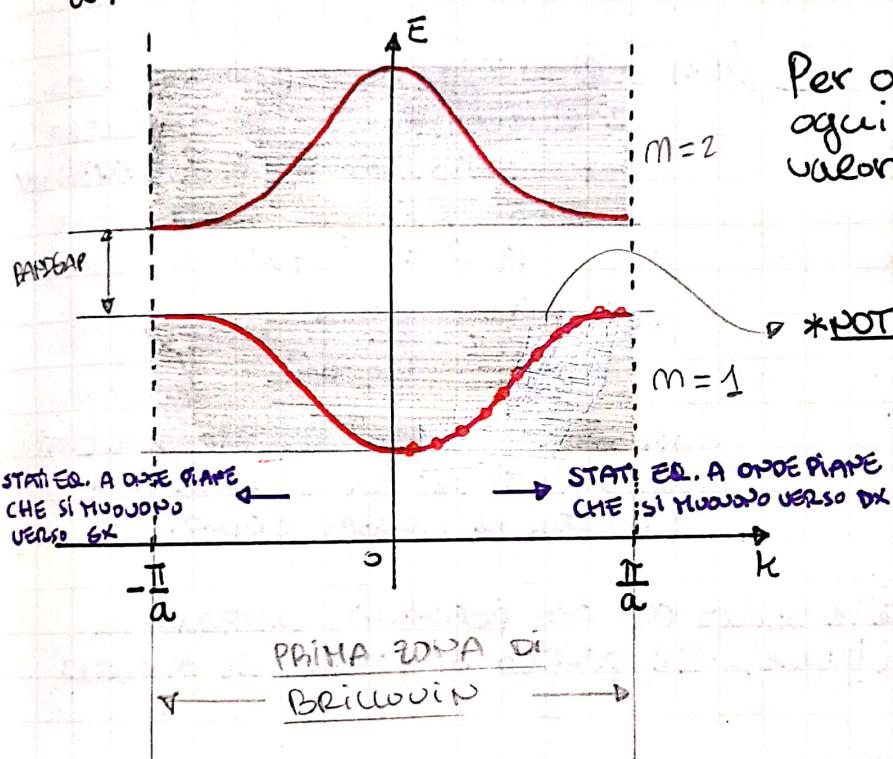
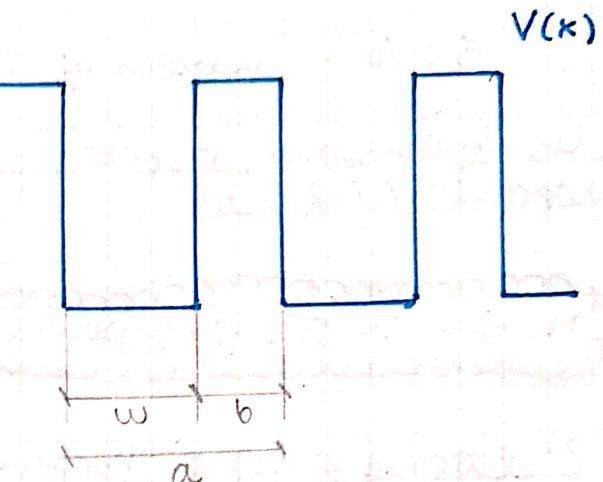
La discretizzazione è comunque molto  
fine, la trattiamo come un continuo

Ricapitolando, per il Modello di KRONIG-PENNEY, in un reticolo periodico di atomi, a cui corrisponde un potenziale periodico, gli AUTOVALORI ENERGETICI associati alla equazione di Schrödinger si traducono in BANDE DI ENERGIA (separate da BANDGAP)

Per reticolo periodico ce' autovalori - cui corrisponde abbattimento:

$$\Psi_k(x) = U_k(x) e^{ikx}$$

dove  $k$  e' il vettore d'onda della funzione involucro (ovvero l'onda piana  $e^{ikx}$ ) e  $U_k(x)$  e' una funzione periodica sul passo reticolare  $a$ .



Per ogni BANDA ENERGETICA, ad ogni  $k$  e' associato un preciso valore energetico

\*NOTA: in realtà gli stati non sono 'contini' ma discretizzati. Per le condizioni al contorno (periodicità al contorno)

$$\Psi(0) = \Psi(\pi)$$

Ci sono in ogni banda  $N$  stati (e corrispondenti  $k$ ), con  $N$  il numero di atomi (buie) del reticolo.

\*NOTA: per ogni onda che si muove verso una direzione ce' un'onda equivalente, allo stesso autovalore che si muove verso la direzione opposta.

In altre parole per un elettrone che si muove in una direzione in un reticolo corrisponde un altro elettrone con momento opposto.

Il modello di Kronig-Penney ha validità sia per elettroni con energia  $E < V_0$  che  $E > V_0$ .

↓  
elettrone  
Maggiormente  
vincolato alle  
buie. Si sposta  
con fenomeni di  
tunneling.

→ elettrone in teoria 'libero'.

Soltanto comunque la periodicità del reticolo che ne impedisce la trattazione come elettrone libero.

Al bordo del cristallo vedrà una sorta di barriera infinita, con conseguente RIFLESSIONE.

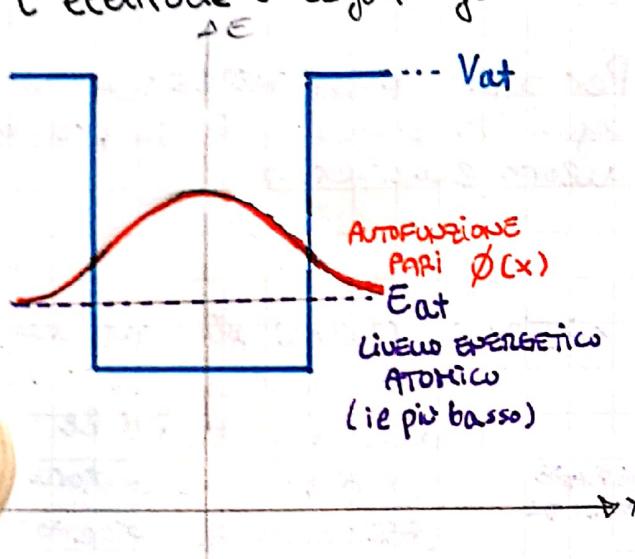
Le due situazioni ( $E < V_0$  e  $E > V_0$ ) sono diametralmente opposte e possono essere studiate con due approssimazioni:

- $E > V_0$ : modello di **WEAK BINDING** (legame forte)
- $E < V_0$ : modello di **TIGHT BINDING** (legame debole)

che forniscono, rispetto al modello di Schrödinger, un approccio più fisico.

### Modello di TIGHT-BINDING

L'elettrone è legato fortemente ad un atomo di partenza.



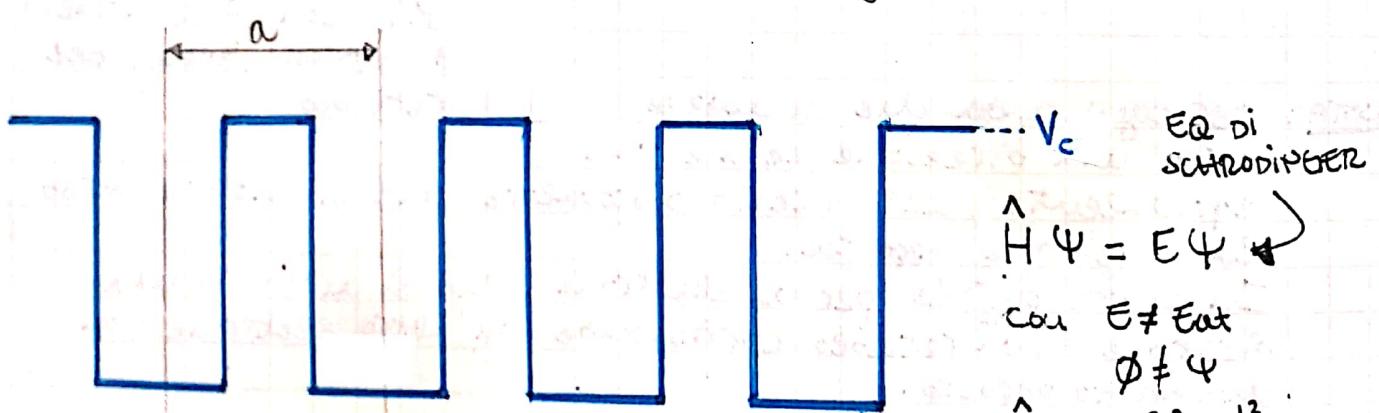
$\phi(x)$  è l'autofunzione pari associata al livello energetico più basso  $E_{at}$ ; soddisfa l'eq. di Schrödinger

$$\hat{H} \phi = E_{at} \phi$$

$$\text{con } \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2}{dx^2} + V_{at}$$

Supponiamo quindi di conoscere tutti questi dati per una singola buca associata ad un solo atomo.

Supponiamo ora di costruire il nostro reticolo periodico, mettendo in successione tanti atomi (bucce). Il profilo di potenziale diventa:



L'IPOTESI FONDAMENTALE DEL MODELLO DI TIGHT BINDING è che:

L'autofunzione  $\psi$  dell'elettrone nel cristallo è una COMBINAZIONE LINEARE di autofunzioni atomiche

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j c_j \phi(x - x_j)$$

con  $c_j$ : coeff.

$x_j$ : posizione degli atomi

N: n° di atomi (bucce)

nel modello di TIGHT-BINDING dunque l'autofunzione complessiva  $\Psi(x)$  e' combinazione lineare delle autofunzioni delle singole buche (che conosciamo) centrata in ogni atomo del reticolo.

\*NOTA: e'  $1/\sqrt{N}$  serve per effettuare una normalizzazione.

Pensandoci, fisicamente torna che il comportamento complessivo sia una combinazione degli effetti delle singole buche.

↳ Il modello si fonda sulla dipendenza delle elettrone dalla sua condizione iniziale di latomo intrappolato in quanto fa derivare la  $\Psi(x)$  proprio daella  $\phi(x)$  associata a tale condizione.

Ipotizziamo ora che i coeff.  $C_j$  siano dei fattori di FASE:

$$C_j = e^{ikx_j}$$

Questo e' deducibile dal teorema di Bloch per cui l'autofunzione all'interno di un cristallo in qualche modo e' sempre la stessa ( $|\Psi|^2$  periodico), a meno di una variazione in termini di fase (la funzione invecoppo).

Sostituendo:

$$\Psi_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j^N e^{ikx_j} \phi(x - x_j)$$

↳ soddisfa ie teorema di Bloch? avremo:

$$\Psi_k(x+a) = \Psi(x) e^{ika}$$

valutiamo:

$$\begin{aligned} \Psi_k(x+a) &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j^N e^{ikx_j} \phi(x+a - x_j) \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} e^{ika} \sum_j^N e^{ik(x_j-a)} \phi(x - (x_j-a)) \end{aligned}$$

e' la stessa sommatoria ma spostata a dxj  
il passo riferisce a

(perdiamo ie primo passo della sommatoria. Per casella)  
mece per le grotte

$$= e^{ika} \cdot \Psi_k(x)$$

Il teorema di Bloch e' verificato.

In definitiva, l'autofunzione è:

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j^N e^{ikx_j} \phi(x - x_j)$$

AUTOFUNZIONE  $\Psi(k)$   
APPROXIMAZIONE di  
TIGHT-BINDING

Cerchiamo ora gli AUTOVALORI ENERGETICI (anche per cercare una conforma dei risultati ottenuti con Kronig-Penney)

Lo strumento che usiamo per calcolare l'autovalore è:

$$\langle E \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \hat{H} \Psi dx$$

Se  $\Psi$  è un autostato  $\langle E \rangle$  tende al vero autovalore.

Possiamo STIMARE l'autovalore inserendo nell'integrale la  $\Psi$  approssimata secondo tight-binding:

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \frac{1}{N} \sum_{j,n}^N \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikx_j} \phi^*(x - x_j) \cdot \hat{H} \cdot \left[ e^{ikx_n} \phi(x - x_n) \right] dx \\ &\stackrel{j \rightarrow \psi^*}{=} \frac{1}{N} \sum_{j,n}^N e^{-ik(x_j - x_n)} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \phi^*(x - x_j) \left( -\frac{\hbar^2}{m} \frac{d^2}{dx^2} + V_c \right) \phi(x - x_n) dx \end{aligned}$$

costruiamo una matrice (es. con 5 atomi = N)

	1	2	3	4	5
1	X	○			
2	○	X	○		
3	○	X	○		
4		○	X	○	
5			○	X	

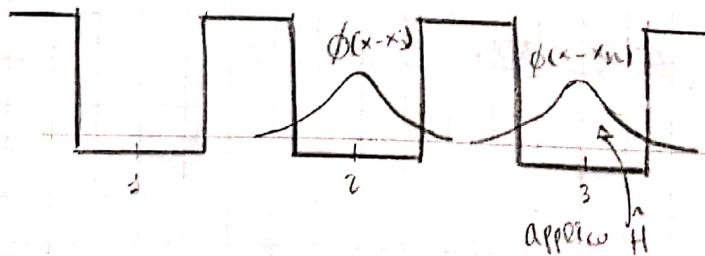
in ogni celletta c'è il contributo dell'integrale per la coppia di  $j, n$ .

a) Quando  $j = n$  le  $\phi$  si riferiscono allo stesso atomo

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \phi^*(x - x_j) \hat{H} \phi(x - x_j) dx \approx E_{at}$$

è lo stesso calcolo che faremmo con le singole atome per stimare l'autovalore (unica differenza  $V_c \neq V_{at}$ )

b) Quando  $j = n \pm 1$  (atomi vicini vicini)



Rispetto al prec. l'integrale è trascurabile (le  $\phi$  si sovrapppongono poco) → decadimento esponenziale

$$\int \dots = -B \text{ (POTENZIALE DI SCAMBIO)}$$

o) In teoria dovremmo considerare  $j = n \pm 2$  (atomi secondi vicini) ma con l'approssimazione non lo consideriamo (non ancora più decadute) e così con gli altri siot della matrice.

Dunque

$$E_k = \frac{1}{N} \left( N E_{at} - \beta N (e^{ika} + e^{-ika}) \right)$$

In teoria  $(N=12)$

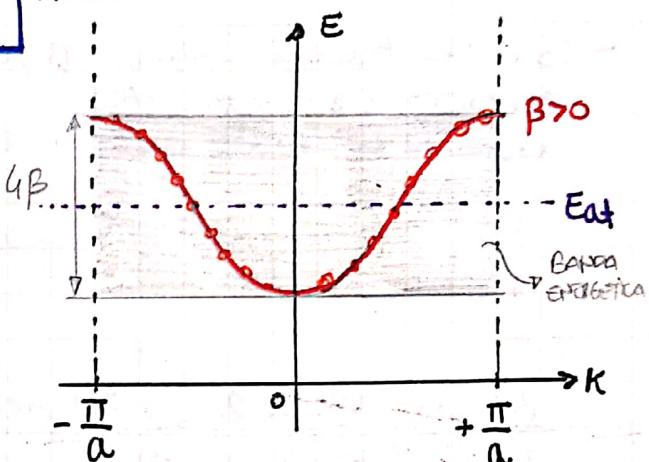
$$\Rightarrow E_k = E_{at} - 2\beta \cos(ka)$$

dipende periodicamente da  $k$

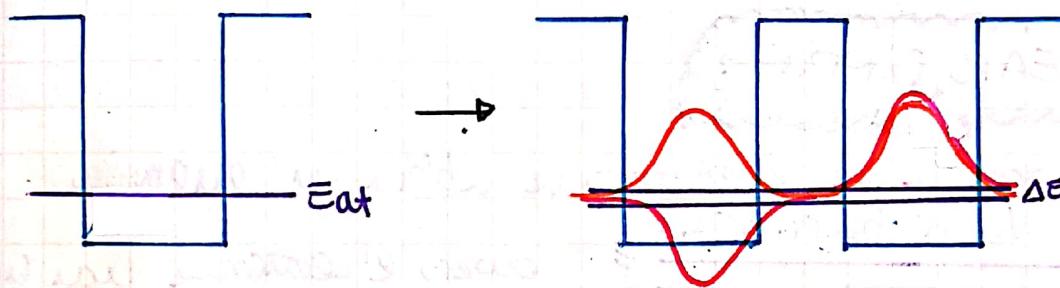
considerando poi anche altri autavalori oltre  $E_{at}$  confermiamo il modello di Kronig-Penney a più bande.

Vale ancora il concetto di BANDGAP e DISCRETIZZAZIONE dei  $k$

AUTOVALORI ENERGETICI



Avevamo inoltre notato con una coppia di buche che:



con l'elettrone che oscilla con freq.

$$\omega = \frac{\Delta E}{\hbar k}$$

$$f = \frac{\Delta E}{\hbar}$$

con  $N$  atomi insieme avremo  $N$  autovetori spartiti (come deducibile dalla discretizzazione dei  $k$ , e dunque, dell'energia)

Pell'intorno di  $k=0$  possiamo approssimare con una parabola

$$E_k = E_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$$

con  $m^*$ : massa efficace, la base a curvatura parabola

(come REC.  
DISPERSIONE  
ELETTRONE LIBERO)

Sviluppo di TAYLOR:

$$E = E(0) + \left. \frac{dE}{dk} \right|_{k=0} k + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2 E}{dk^2} \right|_{k=0} k^2$$

da cui

$$\left( \frac{\hbar^2}{2m^*} \right) = \frac{\hbar^2}{\left. \frac{d^2 E}{dk^2} \right|_{k=0}}$$

MASSA EFFICACE

Nell'intorno di  $k=0$  possiamo approssimare la banda in quell'intorno come una banda di elettrone libero e dunque possiamo trattare l'elettrone come libero a patto di sostituire la massa con quella efficace (dipendente dall'approx. nell'intorno)

Possiamo in prima approssimazione trattare l'elettrone nello stato solo come un ELETTRONE LIBERO con una particolare massa efficace (e di conseguenza possiamo anche trattare forze elettrostatiche, etc...)

Si può giungere tuttavia anche a situazioni 'paradosali' come una massa efficace negativa.

- con una banda  $\beta$  schiacciata ( $\beta$  piccolo) la massa efficace è molto grande (applicando un campo elettrico cui si muove!) l'elettrone è molto mobile
- con una banda ampia ( $\beta$  grande) la massa eff. è molto minore di  $m_e$ , corrente con buche molto vicine (ciclo tunneling)



$\beta$  quantifica l'effetto della vicinanza tra le buche di potenziale, e con la massa efficace quanto si muove l'elettrone.

### MODELLO DI WEAK BINDING

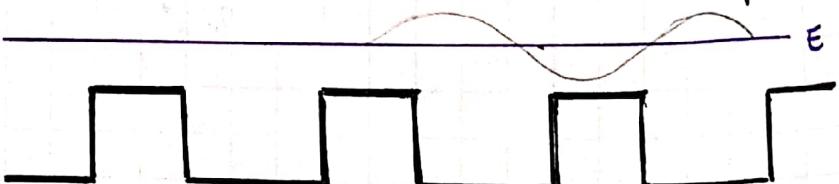
Supponiamo ora che l'elettrone abbia un'energia maggiore di  $V_0$  di barriera:



E. ovvero l'elettrone non ha alcuna parentesi con gli atomi associati al reticollo cristallino.

→ L'elettrone non puo' considerarsi LIBERO, ma risente del reticollo (da cui il modello di weak binding) supponendo di descrivere l'elettrone 'libero' con un'onda piana

$$e^{i(kx - \omega t)}$$



Questa risente della presenza del reticollo, vedendolo come una successione di scalini. L'elettrone oltre a essere rallentato/accelerato può essere anche riflesso, mantenendo  $E > V_0$ , contrariamente alla fisica classica.

Le riflessioni dovute alla presenza di gradini in successione possono anche interagire tra loro.

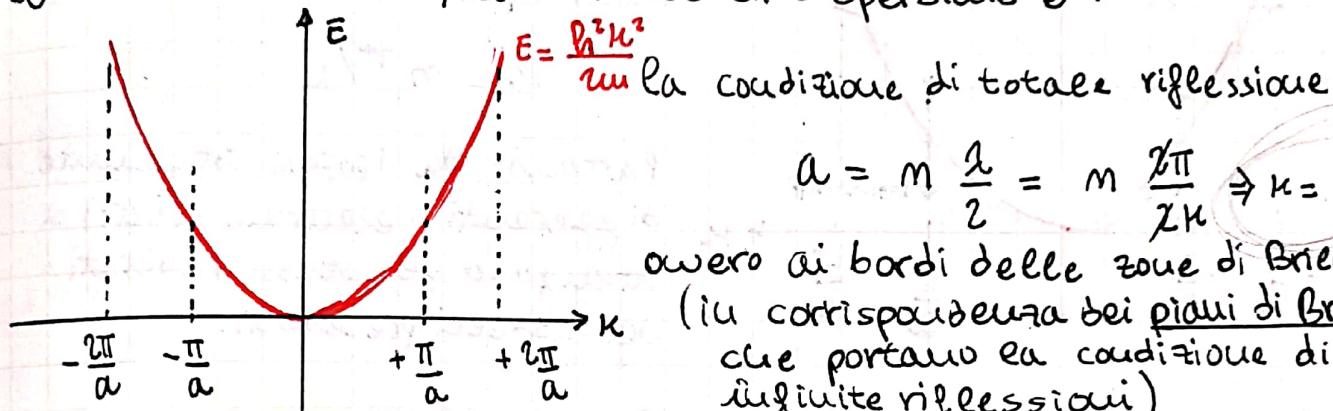
se  $a = m \frac{\lambda}{2}$  c'è INTERFERENZA COSTRUTTIVA delle onde riflesse.

quando ciò accade addirittura l'onda piana 'non va avanti', rimane ferma, poiché viene ripetutamente riflessa, in una direzione e nell'altra.

L'onda resterà pari ampiezze dell'onda che si propaga in una direzione e dell'onda che si propaga nella direzione opposta.

↪ ei su' ONDA STAZIONARIA (non viaggia)

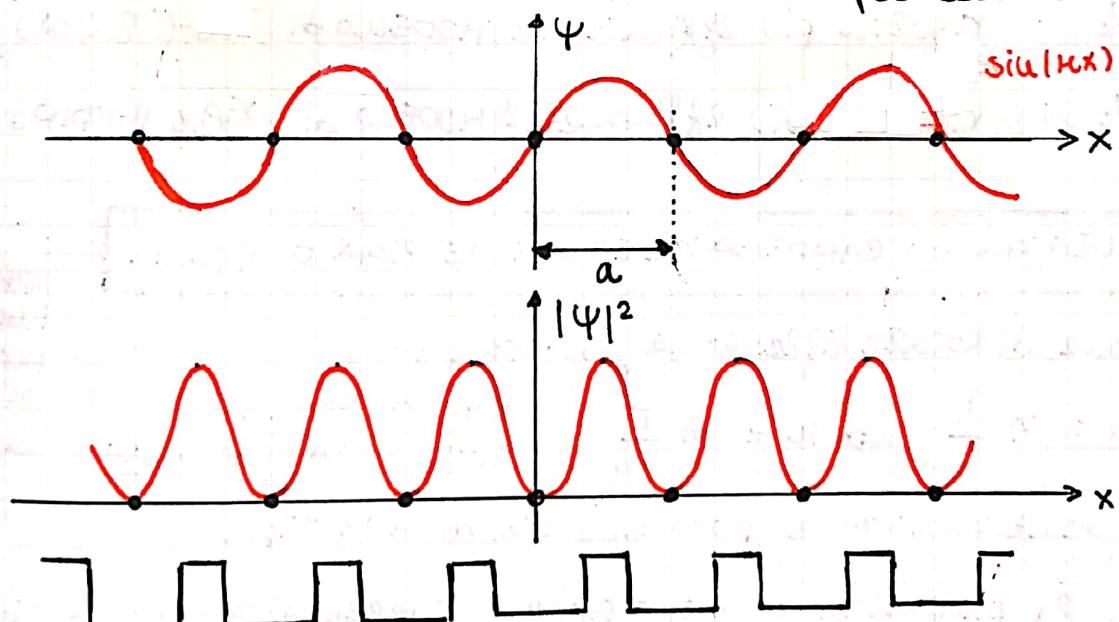
se l'elettrone è libero, la relazione di dispersione è:



$$a = m \frac{\lambda}{2} = m \frac{2\pi}{2k} \Rightarrow k = m \frac{\pi}{a}$$

ovvero ai bordi delle zone di Brillouin.  
(in corrispondenza dei piani di Bragg,  
che portano la condizione di  
infinito riflessione)

se  $a = \lambda/2$  allora un'onda stazionaria può essere:



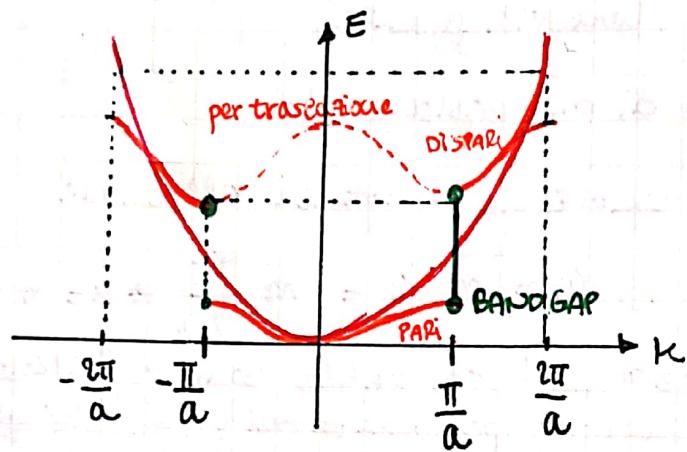
l'elettrone passa la maggior parte del suo tempo nella  
regione di barriera.

l'altra possibile onda stazionaria è di tipo coseno  
(che ha i massimi di |ψ|^2 in corrispondenza degli elettroni  
(passa la maggior parte del suo tempo nella regione di buca)).

se calcoliamo l'autovalore energetico associato alle onde stazionarie

$$\langle E \rangle = \int \psi^* \hat{H} \psi dx$$

si nota, svolgendo i calcoli, che nelle condizioni limite  $k = \pm m \frac{\pi}{a}$  avviene uno 'splitting' dei valori energetici e si perde la continuità nella relazione di dispersione:



si ha l'apertura di un BANDGAP  
in corrispondenza dei

$$k = m \frac{\pi}{a}$$

Partendo da ipotesi totalmente differenti (elettrone libero) si ottengono gli stessi risultati dei modelli precedenti.

Il modello più generico è quello di Kronig-Penney. Poi per ...

$E < V_0$  : risulta più efficace il MODELLO di TIGHT BINDING

$E > V_0$  : risulta più efficace il MODELLO di WEAK BINDING

### NOTE FONDAMENTALI SU BANDE ENERGETICHE NEI PIATTI DI BRAGG

In condizione di totale riflessione, ovvero per

$$a = m \frac{\lambda}{2} \Rightarrow k = m \frac{\pi}{a} \quad (\text{PIATTI DI BRAGG})$$

MOLTO  
IMPORTANTE  
PER BANDE  
DI ENERGIA  
IN 2D e 3D

l'onda è stazionaria, e può essere di due tipi:

- PARI: la particella è NELLA BUCA (livello di energia più basso)
- DISPARI: la particella è NELLA BARRIERA (livello di energia più alto)

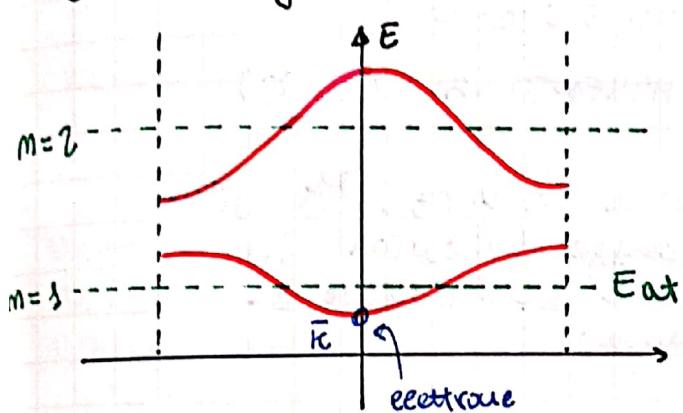
l'elettrone nel reticolo si muove per lo più LIBERAMENTE (la parabola associata alla particella libera approssima bene la banda energetica). Ai bordi tira a causa delle infinite riflessioni della funzione  $\Psi$ , che si sommano costruttivamente, e l'elettrone è fermo. Il suo auto-stato è un'onda stazionaria pari (è una buca) o dispari (è una barriera). Per questo spazio k le  $\partial E / \partial k$  (associato più avanti alla velocità di gruppo) è zero (PUNTO STAZIONARIO) perché l'elettrone è fermo! (maggiori dettagli nel capitolo successivo)

# Le TRASPORTO degli ELETTRONI

- LA TEORIA SEMI-CLASSICA -

Mediante la teoria semi-classica del trasporto degli elettroni si cerca di ottenere, a partire da risultati quantistici, sotto opportune ipotesi, dei risultati 'classici', ovvero interpretabili secondo le nozioni della fisica classica.

Supponiamo un elettrone in banda 'base' e con  $k=0$  (ovvero lo elettrone fermo).



L'elettrone è descritto da:

$$\Psi_k = U_k e^{ikx} \quad \text{con } k = \frac{P}{\hbar}$$

onda piana viaggiante

funzione di Bloch (stazionaria)

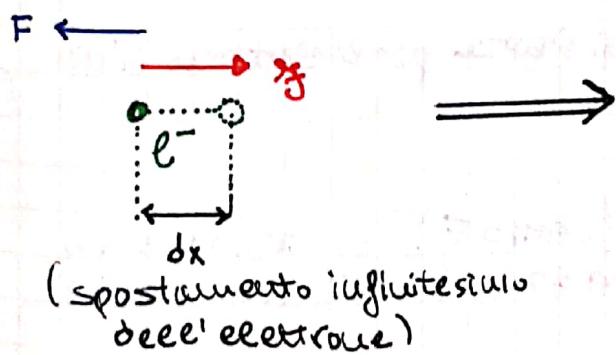
immagine di molea quasi-costante

$\Psi_k$  è il prodotto di un'onda piana viaggiante e una stazionaria. L'elettrone da essa descritto avrà una velocità di gruppo:

$$V_g = \frac{1}{\hbar} \cdot \frac{dE}{dk} \Big|_k = \frac{dw}{dk} \Big|_k$$

VELOCITÀ di GRUPPO  
dell'elettrone.

Cosa accade se applichiamo a tale elettrone una **FORZA ELETROSTATICA** (e dunque un **CAMPIONE ELETTRICO**)?



$\Rightarrow$ : FORZA ELETROSTATICA

$F$ : CAMPO ELETTRICO (FIELD)

Viene compiuto un lavoro  $\int_F dx = dE$  compiuto dalla forza sull'elettrone, aumentandone l'energia totale (accelerandolo)

Vedendolo in una frazione di tempo dt:

$$\int_F dx = \frac{dE}{dt}$$

otteniamo:

$$\frac{d\mathbf{v}_g}{dt} = \frac{dE}{dt} \rightarrow \frac{d\mathbf{v}_g}{dt} = \frac{dE}{dk} \cdot \frac{dk}{dt}$$

che diventa

$$\frac{d\mathbf{v}_g}{dt} \cdot \frac{dE}{dk} = \frac{dE}{dk} \cdot \frac{dk}{dt}$$

$$\Rightarrow \frac{dk}{dt} = \frac{d\mathbf{v}_g}{dt}$$

FORMULA FONDAMENTALE  
della TEORIA SEMI-CLASSICA  
dell'ELETTRONE

(MOMENTO CRISTALLINO)

è importante perché:

- Nella teoria classica la forza  $\mathbf{F}_g$  si traduce, per la legge di Newton, in una accelerazione (che sarà dunque la Forza diviso la massa)
- La teoria semiclassica ci dice una cosa molto simile. La forza  $\mathbf{F}_g$  si traduce nella variazione nel tempo di  $k$ , che possiamo sostituire con  $p/\hbar$  nel caso di elettrone libero (senza  $m_e$ ) da cui

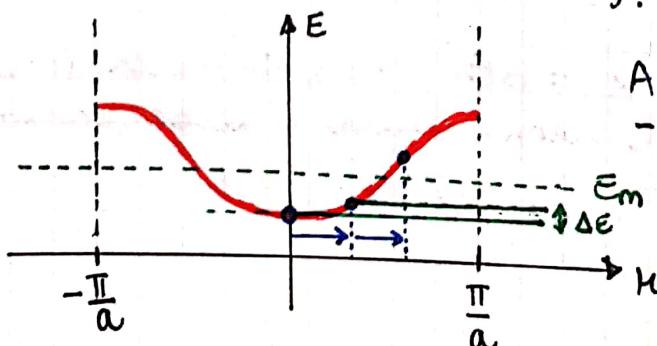
$$\frac{dp}{dt} = \mathbf{F}_g \quad \begin{matrix} \leftarrow \\ \text{ELETTRONE} \\ \text{LIBERO} \end{matrix}$$

LEGGE DI NEWTON

Riotteniamo la legge di Newton per l'elettrone libero.

Cio' che accade è che:

l'applicazione di una forza  $\mathbf{F}_g$  (campo  $E$ ) si traduce in un **MOTORETTOPIPO UNIFORME NELLO SPAZIO K** (ovvero una grafico della relazione di dispersione).



All'applicazione di  $\mathbf{F}_g$ ,  $k$  varia linearmente come:

$$k = k_0 + \frac{\mathbf{F}_g}{\hbar} t$$

modificando conseguentemente la sua energia e velocità di gruppo

la velocità di gruppo cambia:

$$V_g = \frac{\hbar k}{m} = \frac{\hbar}{m} \cdot \frac{g_3}{\hbar} t = \frac{g_3}{m} t \quad \left. \begin{array}{l} \text{per} \\ \text{l'elettrone libero} \end{array} \right)$$

come fisica classica

Così come per la MASSA EFFICACE anche qui facendo una APPROXIMAZIONE PARABOLICA possiamo applicare localmente la legge classica della velocità di gruppo ottenuta poco sopra.

→ pur mantenendo la FORZA  $g_3$  costante notiamo dalla derivata della relazione di dispersione che l'elettrone inizialmente accelererà per poi rallentare e infine assumere velocità negative, periodicamente! (ad ripetersi nelle zone di Brillouin)

Per l'ipotesi di rimanere attorno ad valore di minimo/ massimo valgono le relazioni semi-classiche trovate, a patto di sostituire la MASSA con la MASSA EFFICACE

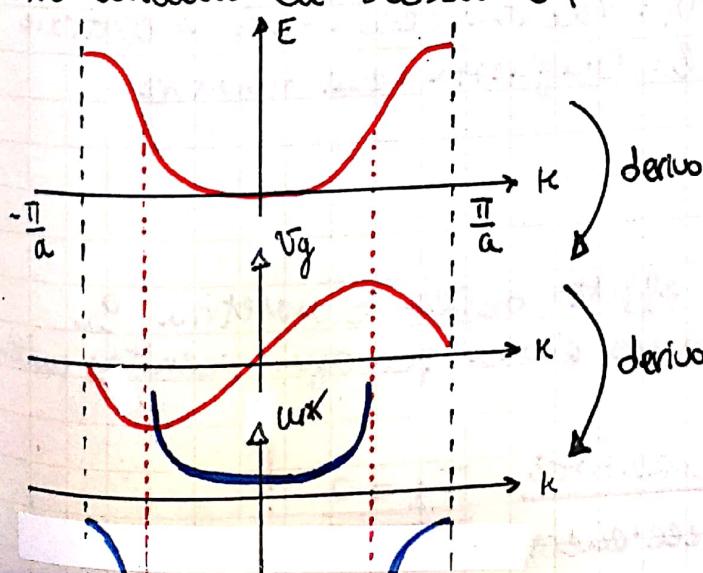
$$V_g = \frac{\hbar k}{m^*} = \frac{g_3}{m^*} t \quad \left. \begin{array}{l} \text{APPROXIMAZIONE PARABOLICA} \\ \text{per la VELOCITÀ DI GRUPPO} \end{array} \right)$$

classicamente vale  $V_g = at$  da cui  $m^* = g_3/a$ :

$$a = \frac{dV_g}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial E}{\partial k} \right) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \cdot \frac{dk}{dt} \rightsquigarrow m^* = \frac{\hbar^2}{\frac{\partial^2 E}{\partial k^2}}$$

$$\hookrightarrow a = \frac{g_3}{\hbar^2} \cdot \frac{\partial^2 E}{\partial k^2} = \frac{g_3}{m^*} \quad \left. \begin{array}{l} \text{ACCELERAZIONE} \\ \text{EFFICACE} \end{array} \right)$$

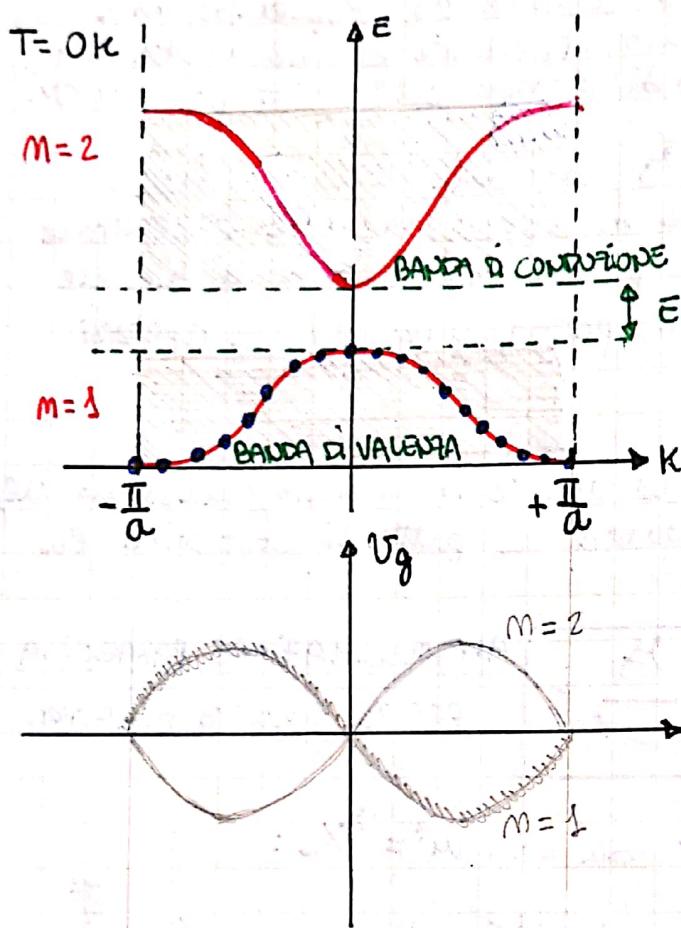
Riotteniamo la stessa espressione di  $m^*$  trovata in precedenza.



In alcune zone applicando la stessa forza  $g_3$  l'elettrone prima accelererà, poi rallenterà, si ferma e cambia direzione.  
COMPORTAMENTO BIZZARRO

al variare della banda (si allunga o si schiaccia) la forza puo' avere effetti molto diversi su velocita' e su massa (a causa dell'impatto sulle derivate)

Supponiamo dunque una coppia di bande separate da BANDGAP  $E_g$  e con concavita' opposte:



Allora la velocita' dell'elettrone dipende dalla derivata

$$\frac{dE}{dk}$$

$E_g$  tutti gli stati della prima banda ( $m=2$ ) sono "pieni" mentre quelli della seconda sono vuoti.

### Banda di Valenza

↳ ultima banda del semiconduttore  
-conduttore ad essere pieno a 0K

### Banda di Condutzione

↳ prima banda interamente vuota.

Quale e' la corrente che scorre nel semiconduttore alla BANDA di VALENZA e di CONDUZIONE?

$$I_1 = \sum_i -\frac{q}{t_i} \quad \text{con } t_i: \text{tempo di attraversamento del semiconduttore dell}'i\text{-esimo elettrone}$$

$$= -q \sum_i \frac{v_i}{l} \quad \text{con } v_i: \text{velocita' dell}'i\text{-esimo elettrone}$$

$\uparrow$

$$l: \text{lunghezza semiconduttore}$$

Sommo tutti gli elettroni  
ovvero tutti gli stati

Osservando la  $v_g$  per  $m=1$  per effetto della simmetria la sommatoria e' zero (in una banda piena per ogni velocita' positiva ce n'è una analogia negativa)

↳ in BANDE PIENE non c'è CORRENTE  $I_1 = 0$ !

(per effetto della simmetria dell'energia)

Questo ragionamento è generalizzabile anche nel caso pluridimensionale.

Supponendo di sostituire la sommatoria con un integrale (formalmente non corretto per esistenza stati discreti, ma la discretizzazione è una semplificazione del caso continuo)

$$I_1 = -\frac{q}{e} \int_{\Omega_K} v_i dK$$

spazio della 1<sup>a</sup> zona di Brillouin

$$= -\frac{q}{e\hbar} \int_{\Omega_K} \frac{\partial E}{\partial K} dK$$

$$= -\frac{q}{e\hbar} [E]_{-\frac{\pi}{a}}^{+\frac{\pi}{a}} = 0$$

periodicità della  
relazione di  
dispersione

poi si può estendere anche alla corrente termica (gli elettroni caldi si muovono di più):

$$I_{th} = \frac{1}{e\hbar} \int_{\Omega_K} \frac{\partial E}{\partial K} \cdot E dK$$

trasportato dall'elettrone  
(energia)

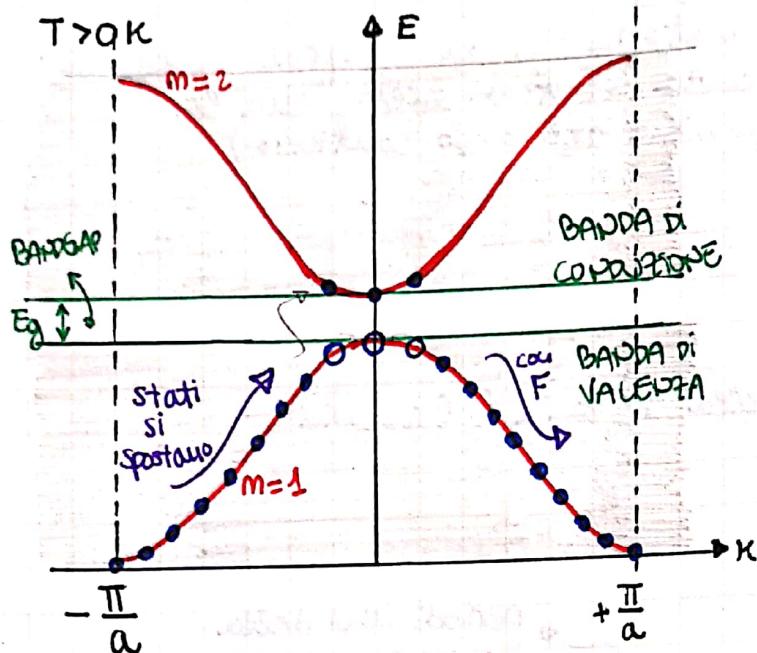
$$= \frac{1}{2e\hbar} [E^2]_{-\frac{\pi}{a}}^{+\frac{\pi}{a}}$$

→ Le BANDE TUTTE PIENE non possono apportare alcun CONTRIBUTO di CORRENTE, neanche termica.

→ e' il caso dei MATERIALI ISOLANTI

(per la banda VUOTA non ci sono stati, dunque la corrente è nulla)

Osserviamo ora cosa accade a temperature  $T > 0K$ :



alcuni degli elettroni della banda di valenza sono passati per generazione termica alla banda di conduzione.

→ c'è uno SVUOTAMENTO di alcuni stati della banda di VALENZA; poiché nella banda di valenza alcuni elettroni hanno avuto la fortuna di incotrare il contributo energetico dei FONONI (per le agitazioni termiche dell'interno del cristallo)

\* NOTA: di solito la BANDGAP è dell'ordine di circa 1eV, mentre le vibrazioni (incontro coi fononi) fornisce circa 25 meV

→ servono molte oscillazioni per effettuare il salto del BANDGAP!

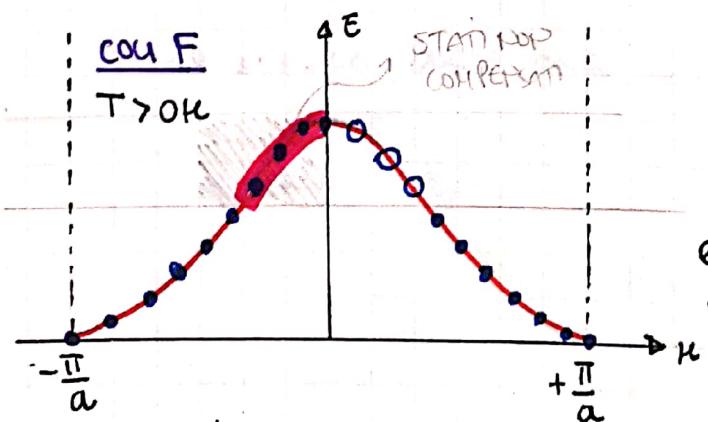
la corrente  $I_1$  nella banda di conduzione:

$$I_1 = -\frac{q}{\hbar} \sum_{\text{STATI PIANI}} v_i = 0 \quad (\text{logico perch\'e si occupano prima gli stati a minore energia})$$

se gli stati che hanno effettuato il salto sono ancora simmetrici

Supponendo però di applicare un campo elettrico  $F = \frac{q}{\hbar} \frac{dE}{dk}$ :

$$\frac{dE}{dt} = \frac{qF}{\hbar} \quad \text{ovvero gli stati si spostano nello spazio } k, \text{ rompendo la simmetria}$$



$$I_1 = -\frac{q}{\hbar} \sum_{\text{STATI PIANI}} v_i \neq 0$$

(in BANDA DI VALENZA)  
e lo stesso accade in BANDA di CONDUZIONE  $I_2$

entrambe le bande contribuiscono alla corrente (stati responsabili)

$I_1$  e  $I_2$  sono CORRENTI EQUIVVERSE (nonostante la  $v_i$  sia opposta)

la probabilità che gli elettroni passino per generazione alla banda di conduzione è molto bassa. Seppur pochi però, gli stati vuoti sono i responsabili della corrente.

→ non ha senso trattare tutti gli stati pieni se solo quegli scoperti sono responsabili della corrente

Allora:

$$I_1 = -\frac{q}{e} \sum_{\text{STATI PIENI}} v_i = -\frac{q}{e} \left( \sum_{\text{TUTTI STATI}} v_i - \sum_{\text{STATI VUOTI}} v_i \right)$$

$\Rightarrow \sum_{\text{STATI VUOTI}} v_i = 0 \text{ (per simmetria)}$

$$\rightarrow I_1 = +\frac{q}{e} \sum_{\text{STATI VUOTI}} v_i$$

CONTRIBUTO DI CORRENTE delle LACUNE

Anciche' dire che i responsabili della corrente sono

- gli stati pieni non compensati con carica negativa e attribuendo velocità positiva (nell'esempio)

diciamo che

- i responsabili della corrente sono gli STATI VUOTI (i 'buchi') detti LACUNE con la stessa velocità osservata in corrispondenza degli STATI corrispondenti (nella esempio in banda di valenza velocità negativa) ma con carica POSITIVA



le LACUNE non esistono nella realtà!

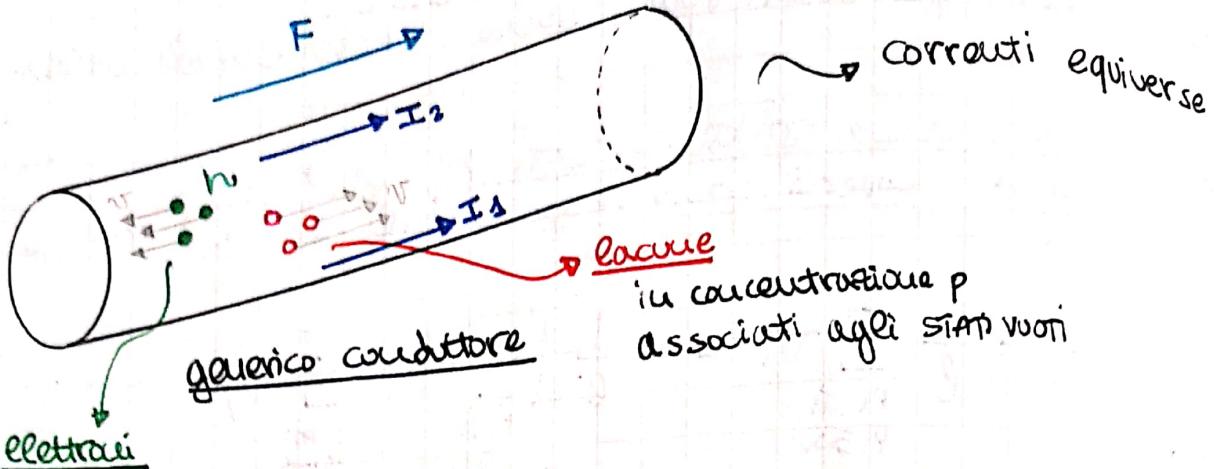
è un artificio matematico per calcolare sommatoria con anche tutti gli stati pieni (molti) solo gli stati vuoti (pochi)

D'ora in poi ci concentreremo su:

$n \rightarrow$  CONCENTRAZIONE DI STATI PIENI (ELETTRONI) IN BANDA DI CONDUZIONE

$p \rightarrow$  CONCENTRAZIONE DI STATI VUOTI (LACUNE) IN BANDA DI VALENZA

a livello macroscopico:



in concentrazione  $N$   
associati agli stati pieni

ci sono dunque due famiglie di portatori:

- elettroni in banda di CONDUZIONE. sono negativi.
- lacune che descrivono gli elettroni in banda di VALENZA

Avevamo trovato in approssimazione semi-classica:

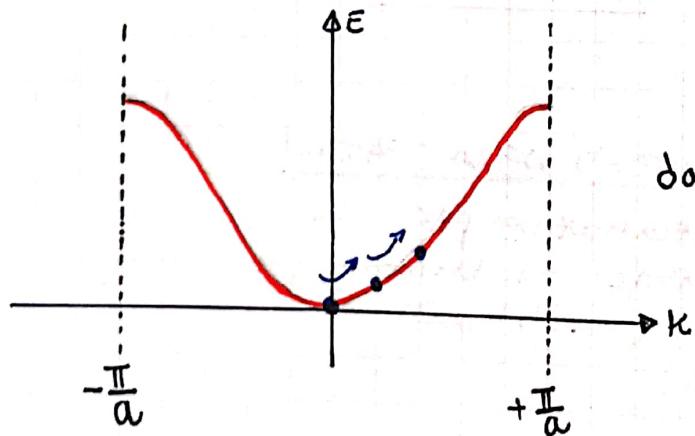
$$y_j \rightarrow \frac{dk}{dt} = \frac{\vec{F}}{\hbar} = \frac{qF}{\hbar}$$

FORZA  
ELETROSTATICA

MOTO UNIFORME IN SPAZIO (elettrone si sposta)

Ma questo in cosa si traduce nello spazio reale?

Supponiamo una generica banda:



$$\tau = \frac{1}{\hbar} \cdot \frac{\partial E}{\partial k}$$

dal modello di TIGHT-BINDING:

$$E(k) = E_0 - 2\beta \cos(ka)$$

otteniamo:

$$\tau = \frac{1}{\hbar} \cdot \frac{\partial E}{\partial k} = \frac{2\beta a}{\hbar} \sin(ka)$$

Se all'istante  $t=0$   
l'elettrone parte da  $k=0$   
allora:

$$k = \frac{qF}{\hbar} t$$

sostituendo si ottiene

$$v = \frac{qBa}{\hbar} \sin \left( \omega \frac{qF}{\hbar} t \right) \rightarrow \text{andamento sinusoidale della velocità}$$

da cui la corrente elettrica associata a questo elettrone sarà anch'essa sinusoidale:

$$I = -\frac{qV}{l} \propto \sin(\omega t) \quad \text{con} \quad \omega = \frac{qF}{\hbar} \quad \begin{array}{l} \text{EFFETTO DELLE} \\ \text{OSCILLAZIONI} \\ \text{DI} \\ \text{BLOCH} (Y_n \text{ THz}) \end{array}$$

cio' vorrebbe dire che applicando un campo costante si ottiene una corrente alternata.

→ IMPOSSIBILE! ci deve essere un'errone' da qualche parte (non osservabile)

Mancava nel modello in dettaglio, ovvero noi abbiamo considerato la forza agente sull'elettrone ma manca la **RISPOSTA DEL SISTEMA AL MOTO DELL'ELETTRONE**, ovvero lo **SCATTERING**.

L'elettrone può incontrare all'interno del cristallo dei DIFETTI:

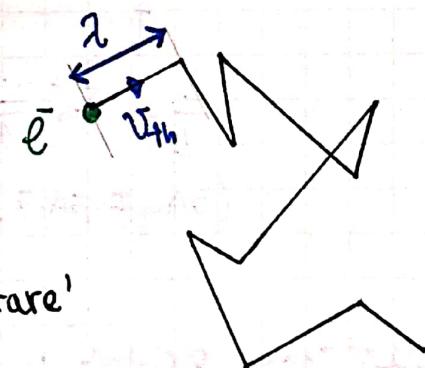
DIFETTI → 'PUNTO' = VACANZE (atomi mancanti)  
IMPUREZZE IONIZZATE (drogante del semiconduttore)

↓ → Fotoni (vibrazioni elastiche del cristallo)  
sono quasi-particelle  
descritte da meccanica quantistica

alterano il  
moto dell'elettrone

→ MOTO BROWNIANO

l'elettrone interagisce con  
qualcosa che lo fa 'scatterare'  
ovvero subisce un urto che ne  
cambia la direzione del moto.

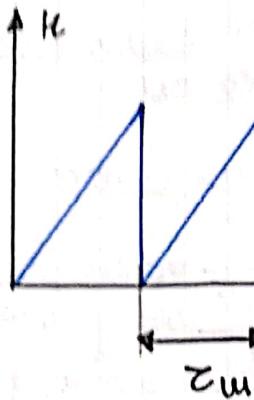


Gli urti avvengono costantemente, in un vero e proprio percorso a ostacoli.

Si chiama LIBERO CAMMINO MEDIO (distanza media percorsa fra due urti successivi, MEAN FREE PATH). Ciò è il TEMPO DI PASSAMENTO MEDIO (ovvero il tempo medio in cui l'elettrone cambia il suo momento, ovvero subisce un urto).

( $\tau_{th}$ : valore tipico dovuto alla temperatura, presente anche senza F)

Quello accade nello spazio- $k$  è:



per semplicità matematica  
è supposto che il rientro  
-mento del momento  
vada a zero.

OSCILLAZIONE DI BLOCH  
DI STURBATA  
(costantemente!)

Nello spazio reale l'elettrone ha la sua velocità termica  
e di solito

$$\tau_m = 10^{-13} \text{ s}$$

con

$$V = 1 \text{ THz}$$
  
BLOCH

Allora  $\tau_m \ll \frac{1}{V_{\text{BLOCH}}}$  ovvero l'elettrone molto prima di arrivare

a bordo zona subisce uno scattering. Questo è il motivo per  
cui il fenomeno di oscillazione dell'elettrone è difficilmente  
osservabile nella reale.

Di solito inoltre:

$$\lambda = V_{\text{th}} \cdot \tau_m \approx 10^{-6} \text{ cm} = 10 \text{ nm}$$
 lungo considerando  
che il passo reticolare  
a è  $< 1 \text{ nm}$

$$\frac{1}{2} m V_{\text{th}}^2 \approx \frac{3}{2} K T \Rightarrow V_{\text{th}} \approx 10^7 \frac{\text{cm}}{\text{s}}$$
  
(GAS IDEALE) principio di  
EQUILIBRIO  
DELL'ENERGIA

l'elettrone prima di scattare percorre molti passi reticolari  
ovvero pensando alla autoformazione  $\Psi$  e al teor. di Bloch, molte  
buche di potenziale

↳ cui è la buca di potenziale cui i difetti i principali  
responsabili dello scattering

\*NOTA: ora si capisce perché il modello di Kröning-Pennuy contempona  
costante buca di potenziale.

E' un elettrone quasi libero che si muove ad di sopra delle buche/barche  
sai che queste lo disturbano effettivamente nel suo moto.

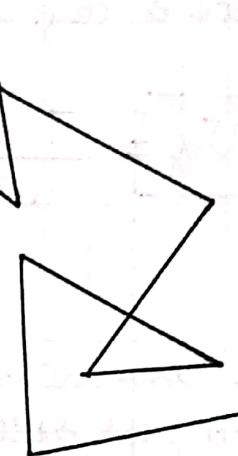
## MODELLO DI DRUDE

L'elettrone viene continuamente deviato, oggi

$$\tau_m \approx 10^{-13} \text{ s}$$

e possiede inoltre una velocità termica

$$v_{th} \approx 10^7 \text{ cm/s}$$



Ne consegue che la TEORIA SEMICLASSICA È INCOMPLETA

$$\frac{dk}{dt} = q \frac{F}{\hbar}$$

incompleto!

dove compare l'effetto dello scattering.

### Motore cristallino

Il concetto fondamentale alla base del MODELLO DI DRUDE è

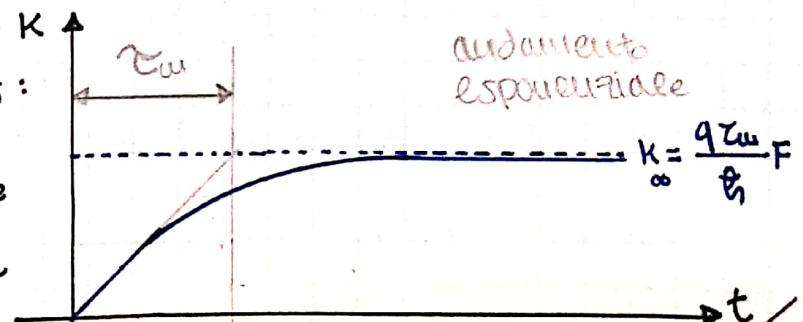
l'effetto delle continue collisioni degli elettroni con i dipoli e' come quello di uno SMORTAMENTO DELLA VELOCITÀ, di un ATTACCO, che ne ostacola l'accelerazione dell'elettrone:

$$\frac{dk}{dt} + \frac{k}{\tau_m} = \frac{qF}{\hbar}$$

nello spazio- $\mu$  a seguito della applicazione di una FORZA ELETROSTATICA  $\frac{qF}{\hbar}$  l'ELETTRONE si muove di MOTO UNIFORME sull'asse  $K$  crescente per il primo contributo. L'effetto degli urti e' quello di 'resettare' casualmente le  $k$  (PERDITA DEL MOMENTO A OGNI URTO) descritto da 'una forza viscosa proporzionale velocità' (dunque proporzionale a  $k$ ) che frena il moto dell'elettrone. Il secondo contributo portato dall'altro membro diventa negativo e frena l'aumentare di  $k$ .

Allendendo in  $t=0$  la forza  $\frac{qF}{\hbar}$ :

$$k = \frac{q\tau_m F}{\hbar} \left( 1 - e^{-\frac{t}{\tau_m}} \right) \sim k \text{ cresce e poi si ferma}$$



un campo costante determina una velocità costante, legata al valore di regime  $\mu_{\text{reg}}$ . Per l'approssimazione parabolica:

$$\boxed{\nabla g = \frac{t_i k}{w^*}} = \frac{t_i}{w^*} \frac{q \tau_{\text{inj}} F}{t_i} = \frac{q \tau_{\text{inj}} F}{w^*} = \boxed{\mu F}$$

VELOCITÀ REGIME DELL'ELETTRONE  
MOBILITÀ

dunque una grandezza che descrive la velocità dell'elettrone per campo costante  $F$  è:

$$\boxed{\mu_n = \frac{q \tau_{\text{inj}}}{w_n^*}}$$

MOBILITÀ  
ELETTRONI IN  
BANDA DI CONDUZIONE

elettrone 'pesante', poco mobile.  
elettrone 'leggero' molto mobile.

se  $\tau$  aumenta, l'urto avviene dopo, l'elettrone accelererà di più

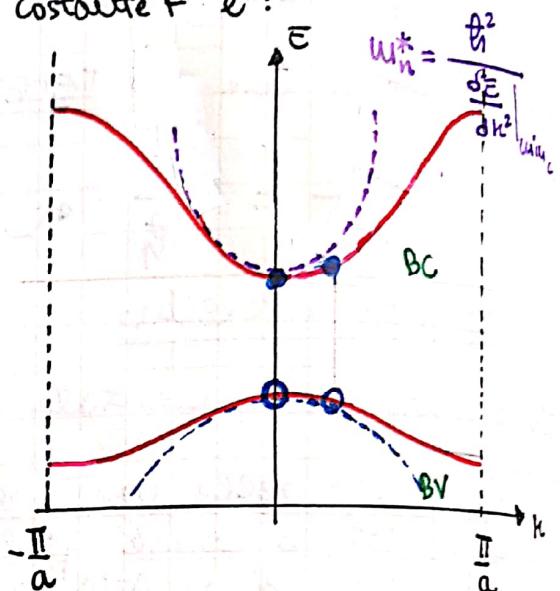
$$\boxed{\mu_p = \frac{q \tau_{\text{inj}}}{w_p^*}}$$

MOBILITÀ LEGGERA  
IN BANDA DI VALENZA

valori tipici sono:

$$\mu = 300 - 1000 \left[ \frac{\text{cm}^2}{\text{V} \cdot \text{s}} \right]$$

Velocità proporzionale al campo.



gli elettroni promossi in banda di conduzione si muovono a posizioni negli stati meno distanti energeticamente (per questo si sceglie  $w_n^*$  in zero)

Possiamo stimare delle proprietà macroscopiche del portatore, come la DENSITÀ DI CORRENTE  $j$ :

$$\boxed{j_h = \underbrace{q \cdot n \cdot v}_{\substack{\text{carica} \\ \text{concentrazione} \\ \text{velocità}}} = q \cdot n \cdot \mu_n \cdot F = \sigma_n \cdot F}$$

DENSITÀ DI CORRENTE (elettroni)

$$[\text{n}^{-1} \text{cm}^{-3}] \quad \boxed{\text{RESISTIVITÀ } \rho}$$

$$\rho_n = \frac{1}{\sigma_n} = \frac{1}{q n \mu_n} \quad [\Omega \cdot \text{cm}]$$

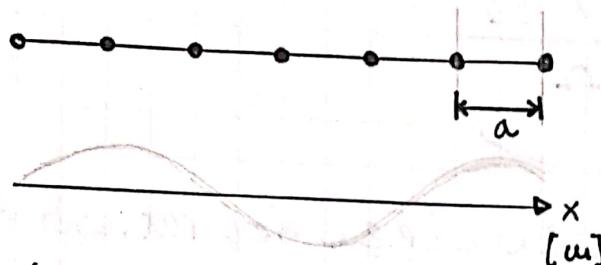
# il RETICOLO RECIPROCO

entriamo nel dettaglio dello spazio-k, introducendo il concetto di reticolo reciproco, ovvero l'equivalente nello spazio-k di un reticolo reale.

$\hookrightarrow k \text{ e' } \text{m}^{-1}$ ; ecco perche' reciproco!

Supponiamo un'onda piana in una dimensione:

1D  $e^{ikx}$



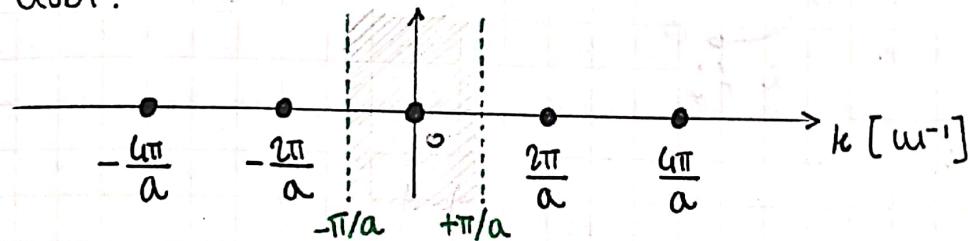
l'onda e' periodica sui nodi del reticolo allora

$$e^{ig(x+a)} = e^{ikx}$$

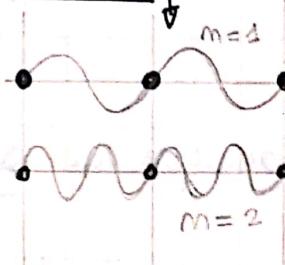
da cui  $e^{iga} = 1 \rightarrow ga = 2\pi m \rightarrow g = \frac{2\pi}{a} m$

$$\boxed{g = \frac{2\pi}{a} m}$$

sull'asse  $k$  possiamo mettere tutti questi nodi:



(atomi)   
 SPazio REALE   
 Reticolo RECIPROCO



Si ottiene appunto un RETICOLI 'RECIPROCO' in spazio-k

→ la 1<sup>a</sup> ZONA di Brillouin e' la CELLA DI WIGNER - SEITZ (punti più vicini all'origine rispetto ai nodi corrispondenti)  
e' lungo un passo di reticolo reciproco.

Qui sono contenuti tutti gli STATI ELETTRONICI del reticolo. E' qui che rappresentiamo le bande.  
(al di fuori della prima zona sono replicate)

3D

$e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$

$$\rightarrow e^{i\mathbf{g} \cdot \underline{\mathbf{B}}} = 1$$

$$\underline{g} : e^{i\underline{g}(\underline{k}+\underline{B})} = e^{i\underline{g}\underline{r}} \quad \underline{g} \cdot \underline{B} = 2\pi m$$

Si dimostra che se  $\underline{B} \rightarrow$  reticolo di Bravais  $\underline{B} = m_1 \hat{a}_1 + m_2 \hat{a}_2 + m_3 \hat{a}_3$

$$\underline{g} = m_1 \underline{b}_1 + m_2 \underline{b}_2 + m_3 \underline{b}_3$$

con  $m_1, m_2, m_3$  interi

$\underline{b}_1, \underline{b}_2, \underline{b}_3$  vettori reticolo reciproco

si ha che

$$\underline{b}_1 = 2\pi \frac{\underline{a}_2 \times \underline{a}_3}{\Omega} \quad \text{VOLUME della cella primitiva}$$

$$\underline{b}_2 = 2\pi \frac{\underline{a}_3 \times \underline{a}_1}{\Omega}$$

$$\underline{b}_3 = 2\pi \frac{\underline{a}_1 \times \underline{a}_2}{\Omega}$$

identifica la cella del reticolo reciproco

se facciamo  $i=j \rightarrow 2\pi$

$$\underline{a}_i \cdot \underline{b}_i = 2\pi \delta_{ij} \quad \begin{cases} i=j \\ i \neq j \end{cases}$$

duque in  $\underline{g} \cdot \underline{B}$ :

$$a_1 \cdot b_3 = 2\pi \frac{\underline{a}_1 \cdot \underline{a}_2 \times \underline{a}_3}{\Omega} = 2\pi$$

$$a_1 \cdot b_2 = 2\pi \frac{\underline{a}_1 \cdot \underline{a}_3 \times \underline{a}_1}{\Omega} \stackrel{(1)}{=} 0$$



$$\underline{g} \cdot \underline{B} = 2\pi (m_1 \omega_1 + m_2 \omega_2 + m_3 \omega_3) = 2\pi m$$

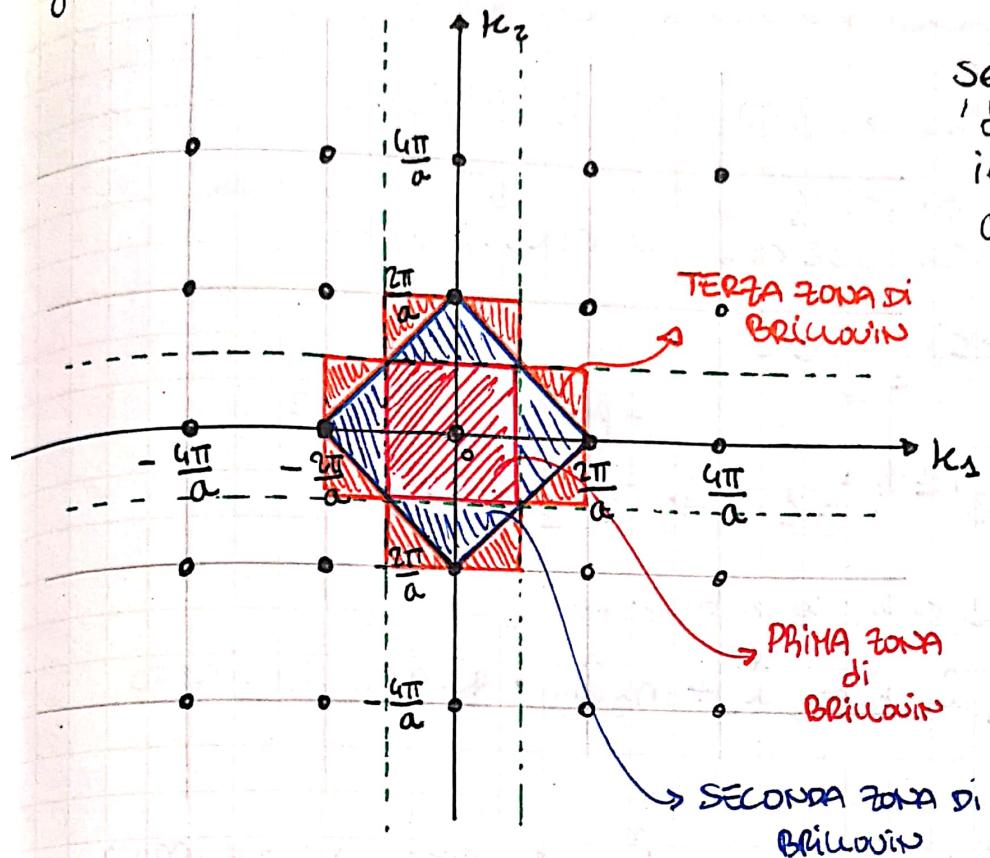
↓  
numero intero m

Nei casi particolari di reticolo spaziale cubico (in 3D); il reticolo reciproco e' ancora cubico con passo reticolare

$$\frac{2\pi}{a}$$

(Prima zona di Brillouin)  
e periodicità!

facendo l'esempio 2D (deducibile dal 3D):



Se abbiamo reticolo 'diretto' quadrato, il reciproco sarà ancora quadrato.

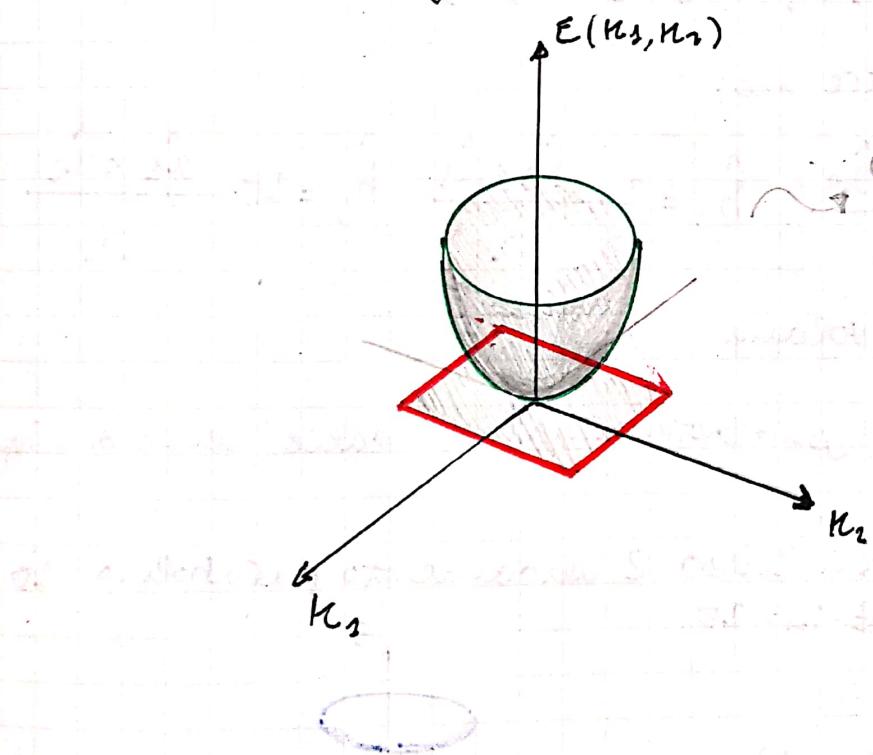
se  $a_3$  uscente:

$$b_3 = \frac{2\pi a_3}{\Omega}$$

AREA CELLA

$$|b_3| = 2\pi \frac{a}{a^2} = \frac{2\pi}{a}$$

le varie zone di Brillouin hanno tutti la stessa area  $\left(\frac{\pi}{a}\right)^2$   
Per rappresentare le BANDE ENERGETICHE sfrutteremo il terzo asse come asse energetico



a bordo zona ci sarà  
BANDGAP

STRUTTURA A BANDE IN DUE e TRE DIMENSIONI

Ripetiamo il concetto di RETICOLO RECIPROCO:

è il reticolo di punti  $\underline{k}$  tali che  $e^{i\underline{k} \cdot \underline{r}}$  ha la stessa periodicità del reticolo reale, cioè:

$$e^{i\underline{k}(\underline{B} + \underline{\zeta})} = e^{i\underline{k}\cdot\underline{\zeta}} \quad \text{periodicità ogni } \underline{B}$$

$$\hookrightarrow e^{i\underline{k} \cdot \underline{B}} = 1 \Rightarrow \underline{k} \cdot \underline{B} = 2\pi m^*$$

con  $\underline{B}$  riferito al reticolo di Bravais

$$\underline{B} = m_1 \hat{a}_1 + m_2 \hat{a}_2 + m_3 \hat{a}_3 \cdot \&lt;/math> RETICOLO DIRETTO$$

e  $\underline{k}$ :

$$\underline{k} = m_1 \hat{b}_1 + m_2 \hat{b}_2 + m_3 \hat{b}_3 \quad \&lt;/math> RETICOLO RECIPROCO$$

duque

$$m^* = m_1 m_1 + m_2 m_2 + m_3 m_3$$

Si dimostra inoltre che:

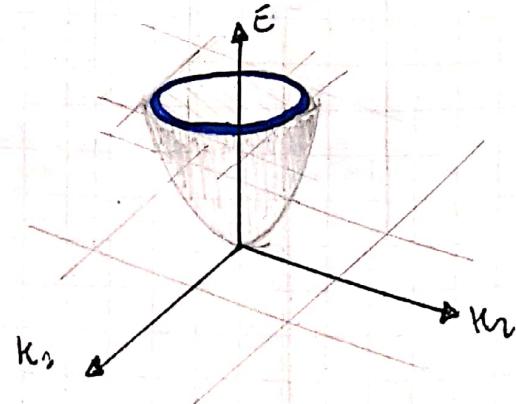
$$\hat{b}_1 = 2\pi \frac{\hat{a}_2 \times \hat{a}_3}{\Omega} \quad \hat{b}_2 = 2\pi \frac{\hat{a}_3 \times \hat{a}_1}{\Omega} \quad \hat{b}_3 = 2\pi \frac{\hat{a}_1 \times \hat{a}_2}{\Omega}$$

con  $\Omega$ : area/volume

Le zone di Brillouin sono determinabili dalle celle di Wigner-Seitz del reticolo reciproco.

Dunque per gli elettronii liberi l'andamento parabolico 1D diventa PARABOLOIDE in 2D

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} (\kappa_1^2 + \kappa_2^2)$$

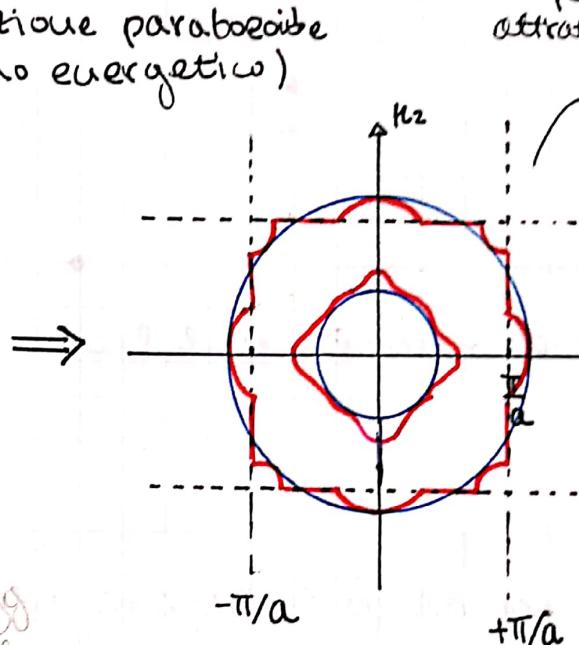
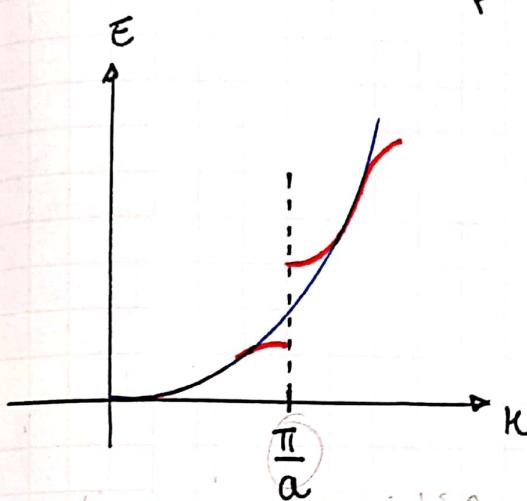


in 3D però questa rappresentazione diventa scomoda:

↳ e' più facile trattare i problemi del PARABOLOIDE (ancora Caso 2D) non in 3D ma in 2D mediante le cosiddette SUPERFICIE DI FERMI (ISOENERGETICA)

contiene gli stati che vengono riempiti preferenzialmente dagli elettroni.

per le paraboloidi si ottiene una linea (intersezione paraboloidi e piano energetico)



per una linea energetica che taglia la 1ZB  
le parti esterne vengono attratte dagli assi  
della 1ZB;  
quelle interne sono proiettate verso l'esterno  
sempre per combaciare con i platti  
di Bragg ( $1ZB$ )

■:  $e^-$  libero  
■:  $e^-$  interagente con reticolo periodico

\*DOTÀ: più ci avviciniamo ai piani di Bragg (bordo zona di Brillouin) più ci sono elenugazioni (splitting) [le paraboloidi si abbassano] (livello interno a 1ZB)

in 3D: consideriamo il reticolo cubico, FCC, BCC.

### Reticolo diretto

cubico

FCC

BCC

### Reticolo reciproco

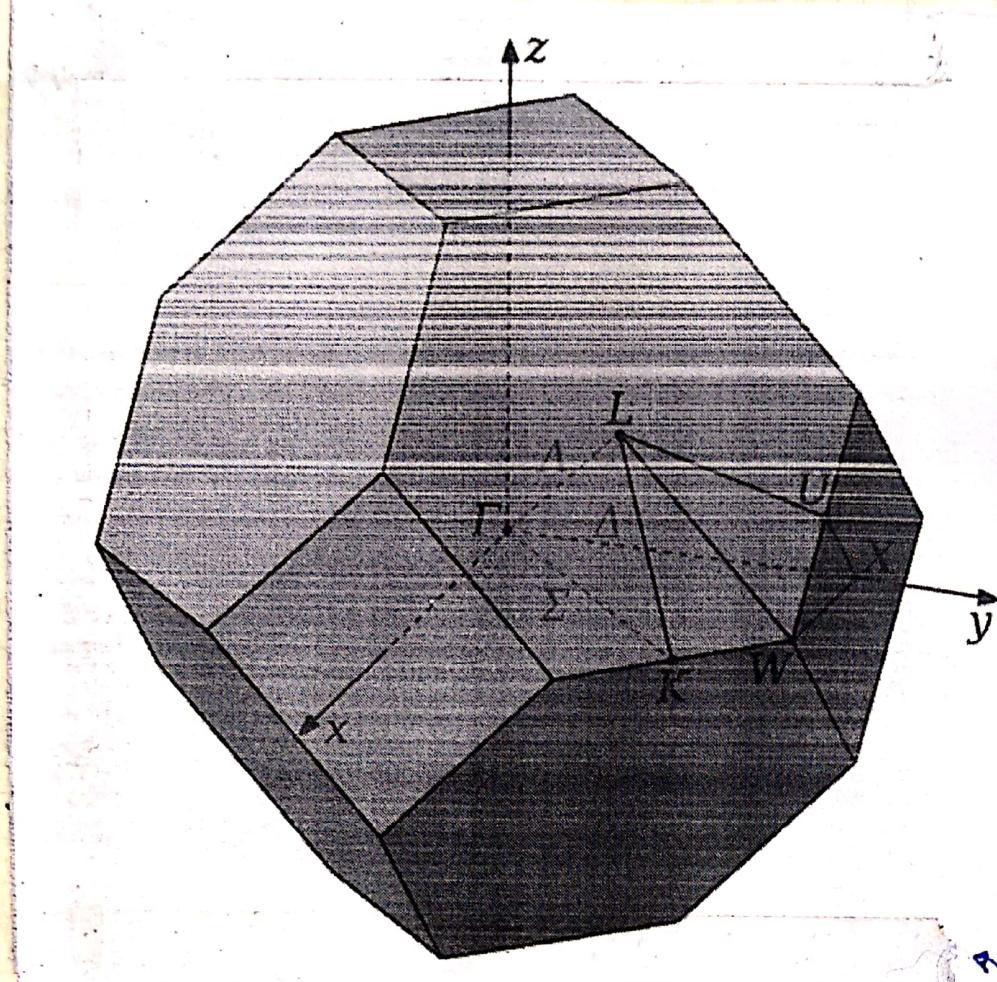
cubico

BCC

FCC

La prima zona di Brillouin è la cella di Wigner-Seitz

Quello che ci interessa e' il reticolo diretto FCC (poiché e' il caso dei semiconduttori, sappiamo base di due atomi)



possiamo votare dei punti/direzioni utilevoli:

$\Gamma$  = centro banda

X = punto di simmetria lungo la direzione (100)

L = punto di simmetria lungo la direzione (111)

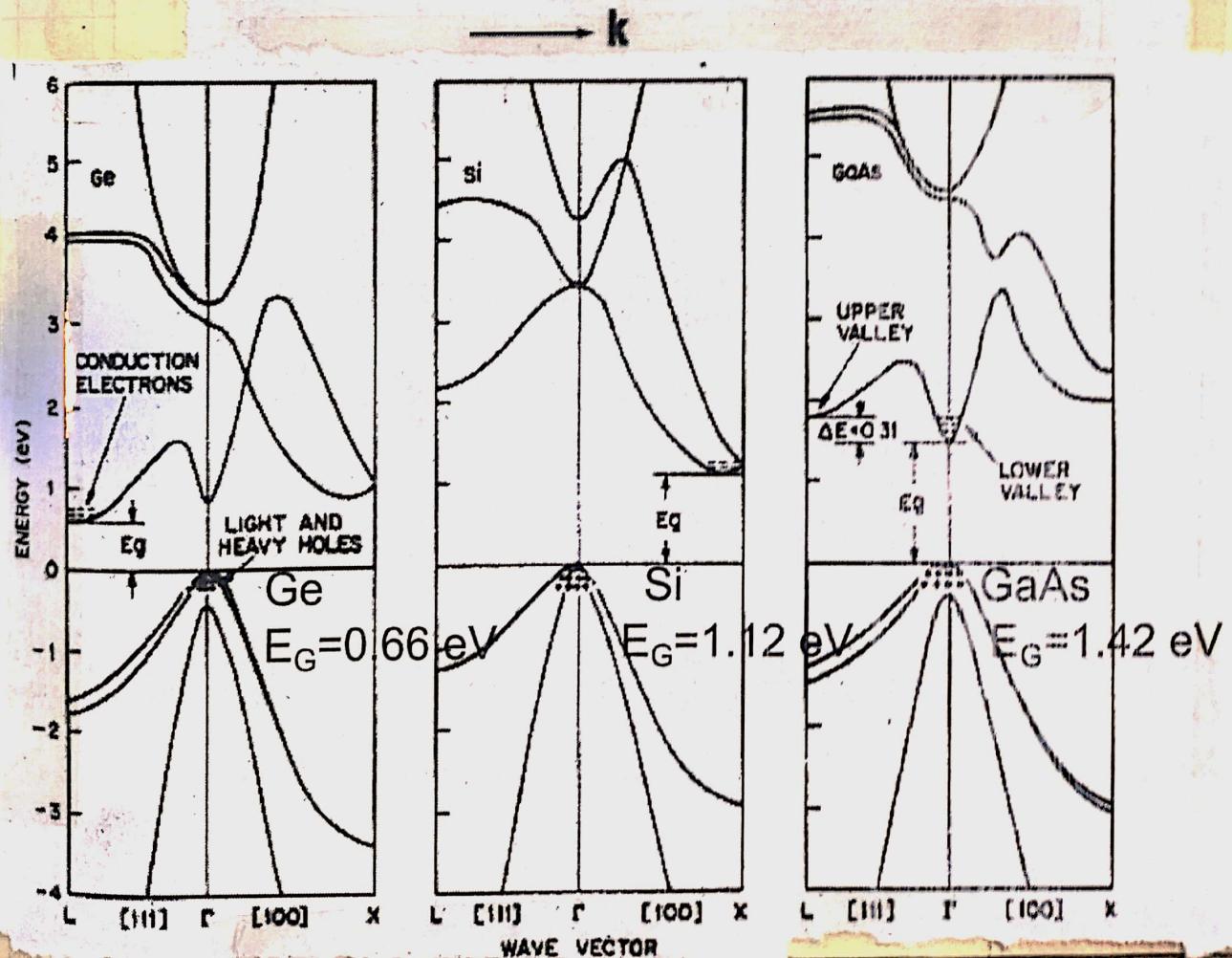
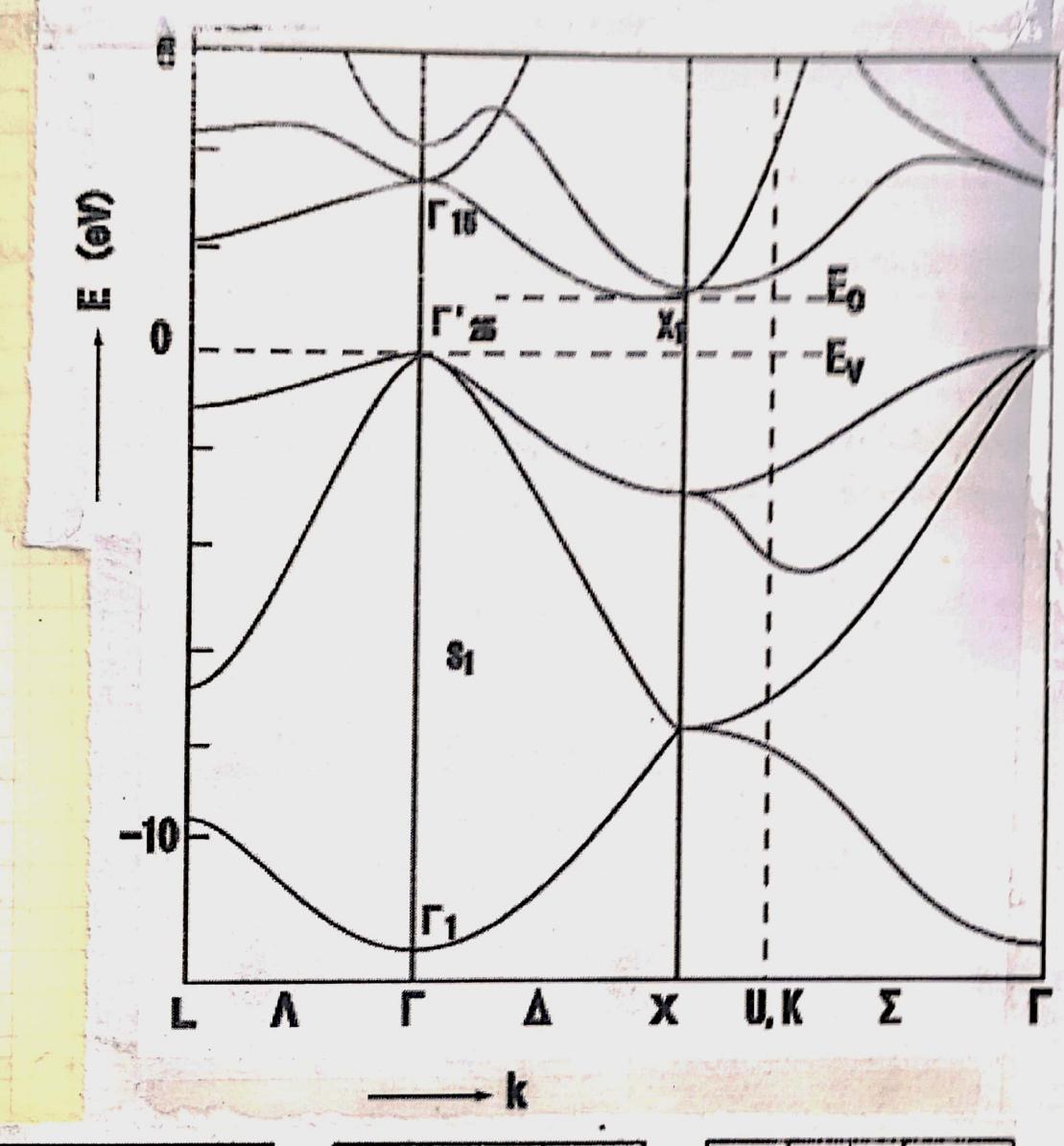
PRIMA ZONA DI  
BRILLOUIN DEL RETICOLO  
CUBICO A CORPO CENTRA-  
TO (RECIPROCO di f)

Dunque riportiamo i profili di energia partendo da un punto e muovendoci verso un altro punto

→ si riportano i vari livelli energetici (bande di energia: valenza e conduzione)

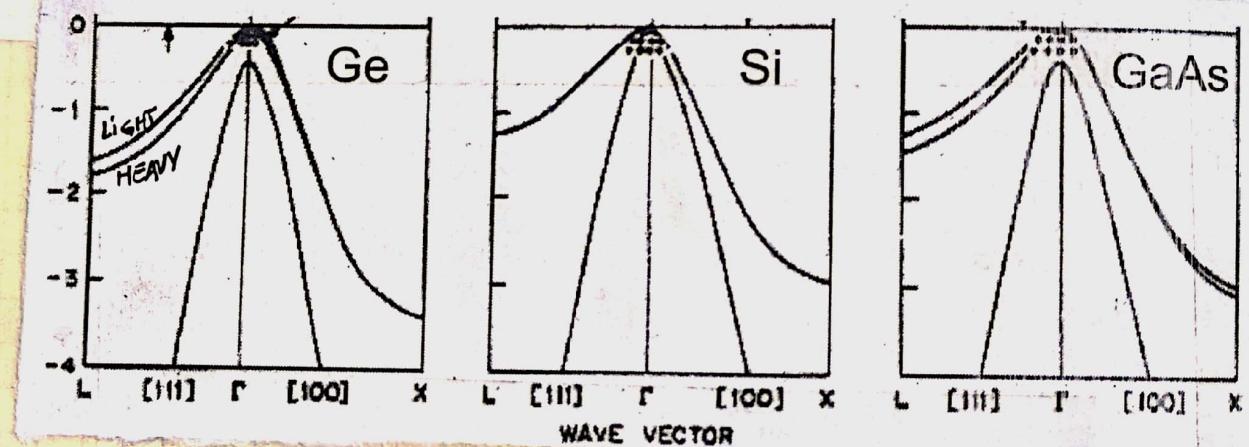
→ intersezione tra la direzione nello spazio  $k_x, k_y, k_z$  e l'aumento dell'energia

→ si nota che a solo molte bande di valenza (4) e poche bande di conduzione (1). Lo zero e' posto per convenzione in corrispondenza del massimo tra le bande di valenza.



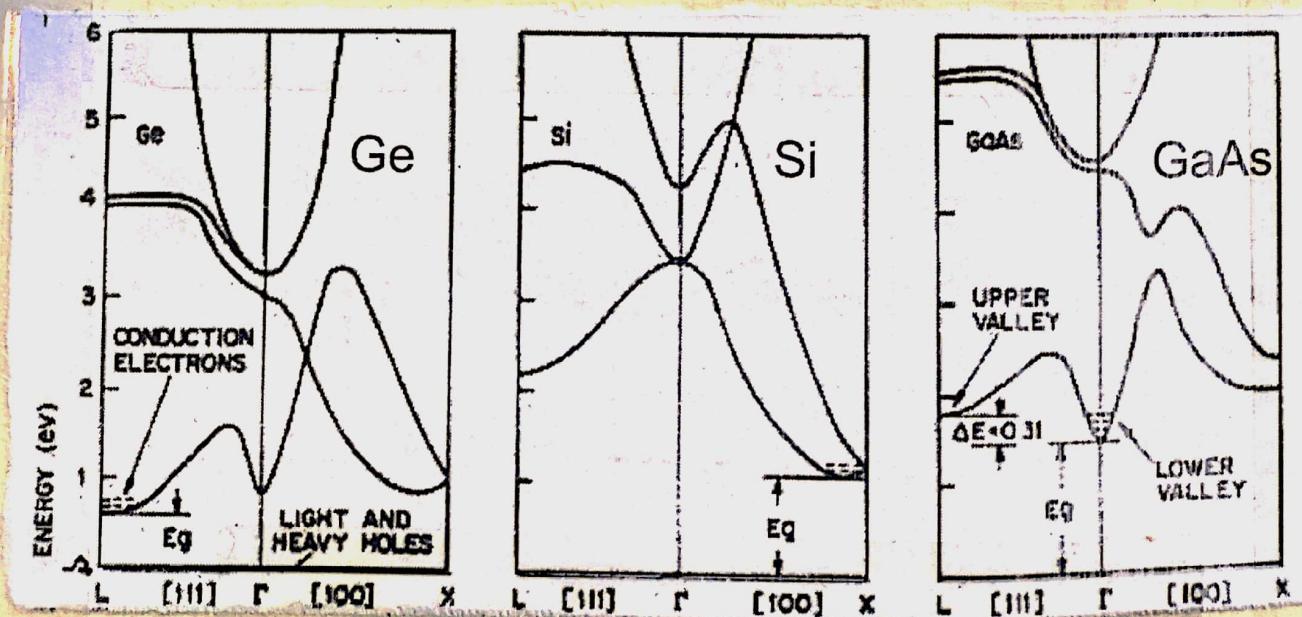
Le 4 bande di valenza sono:

- BANDA di LACUNA LEGGERA o LACUNA PESANTE (con max in  $k=0$ ) in comune
- BANDA di SPLIT-OFF (con massimo  $< 0$ )
- esiste anche una quarta banda di valenza a energia ancora minore, ma e' di poco interesse poiché:
  - ↳ per avere contributo di conduzione dalle lacune (o dalla banda di valenza) dobbiamo svuotare di elettroni.
  - ↳ la banda più in basso si svuota più difficilmente rispetto alle altre ed è dunque di poco interesse.



\* NOTA: Le bande di valenza sono isotrope in  $k=0$

Per le 4 bande di conduzione:



gli elettroni procossi dalla banda di valenza vanno a posizionarsi negli stati a minore energia (poiché più facili da raggiungere con il suono di GAP)

→ spesso i minimi locali sono luogo di VALI DI ENERGIA, ovvero certi punti della cella sono occupati con maggiore probabilità.

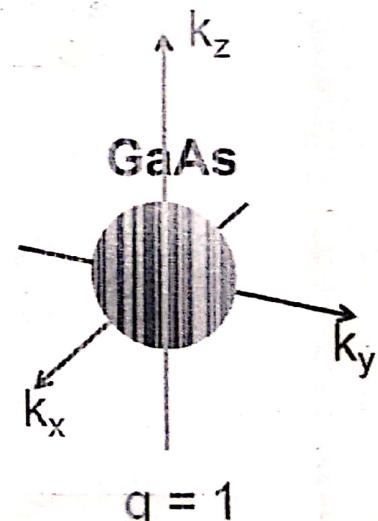
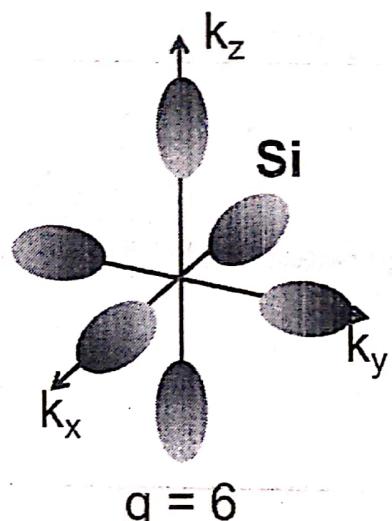
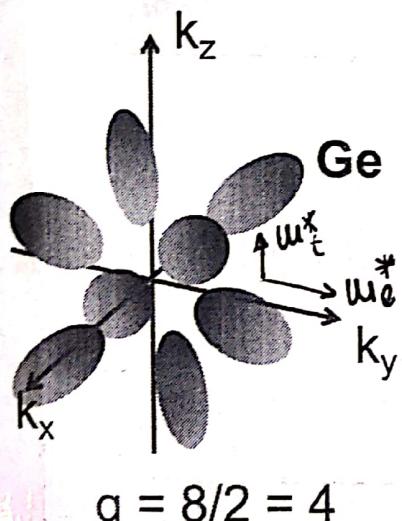
muovendosi lungo direzioni, dalle valle

stessa curvatura vista → **ISOTROPIE**  
in tutte le direzioni

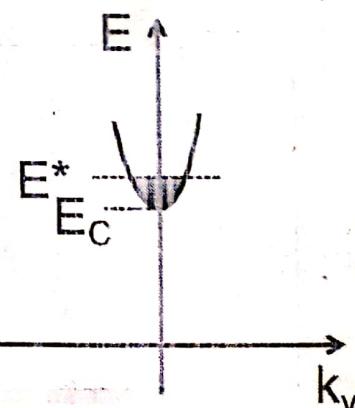
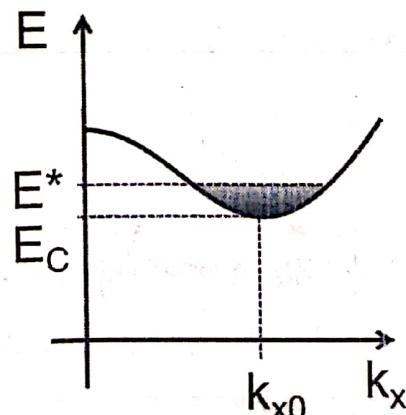
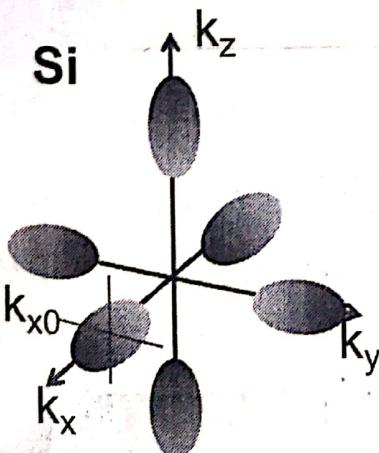
curvature viste differenti → **ANISOTROPIE**

→ con le anisotropie la massa efficace cambia lungo direzioni diverse

scegliendo un valore di energia  $E^*$  possiamo cercare i luoghi dei punti a energia costante (**SUPERFICI DI FERMI**) in numero pari alla degenerazione  $g$  dei minimi in BC.



per ottenere tali superfici:



Nell'intorno del minimo l'energia puo' essere scritta in forma parabolica:

$$E = E_c + \frac{\hbar^2}{m_e^*} (k_x - k_{x0})^2 + \frac{\hbar^2}{m_t^*} k_y^2 + \frac{\hbar^2}{m_t^*} k_z^2$$

APPROX.  
Parabolica

con

$m_e^*$ : massa efficace longitudinale

$m_t^*$ : massa efficace trasversale

Si nota che:

Sì, Ge  $\rightarrow$  superfici di Fermi: ellissoidi di rivoluzione

GaAs  $\rightarrow$  massa unica isotropa

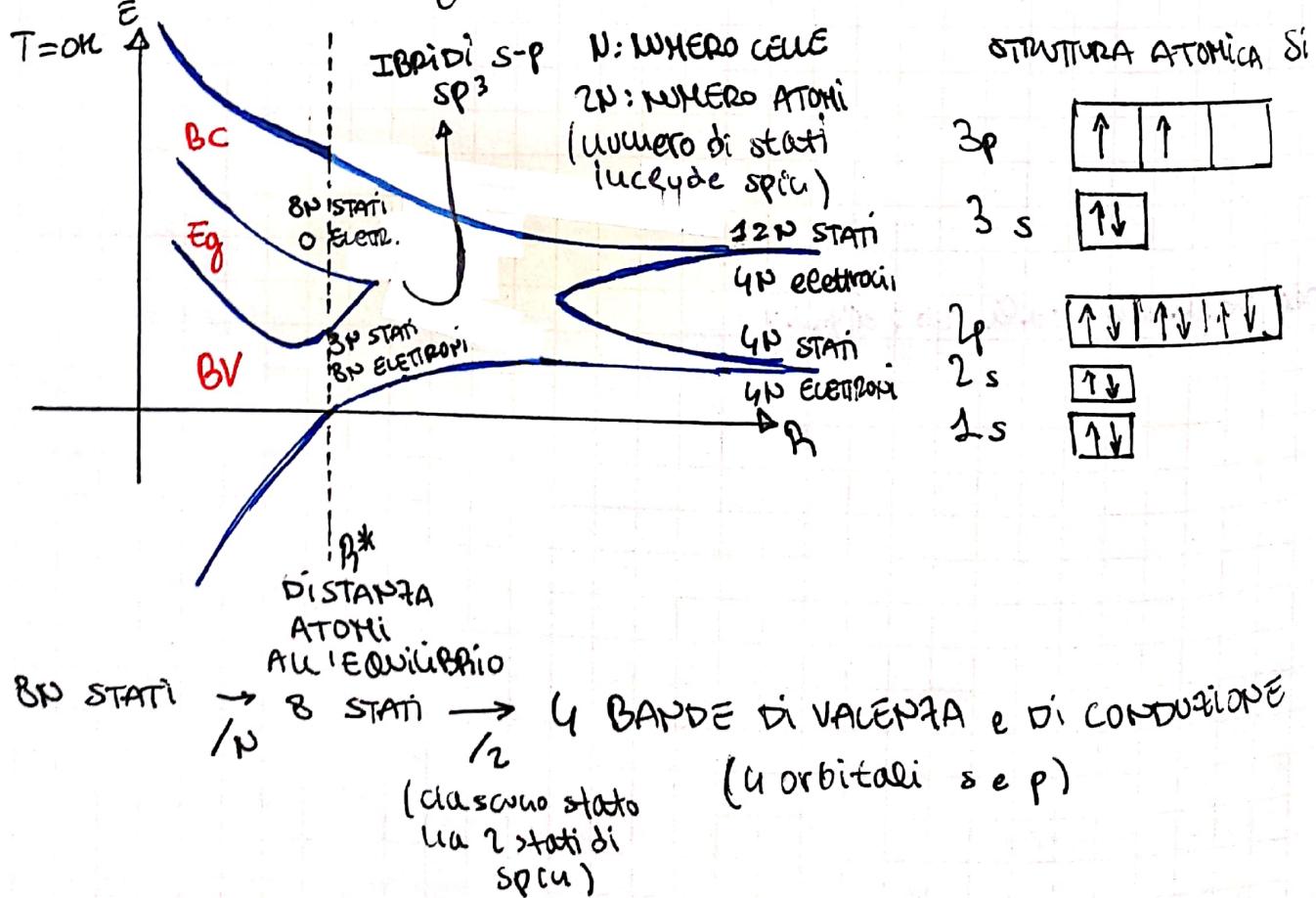
$$E = E_c + \frac{\hbar^2}{m^*} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$$

Sup. di Fermi: sfera

Aanalizziamo il caso del Silicio:

Supponiamo atomi di Silicio molto distanti tra loro (quindi indipendente tra loro).

Avvicinandoli progressivamente (ottenendo i.e. cristallo) si ha lo splitting delle bande, come per le buche:



le DENSITA' DI STATI

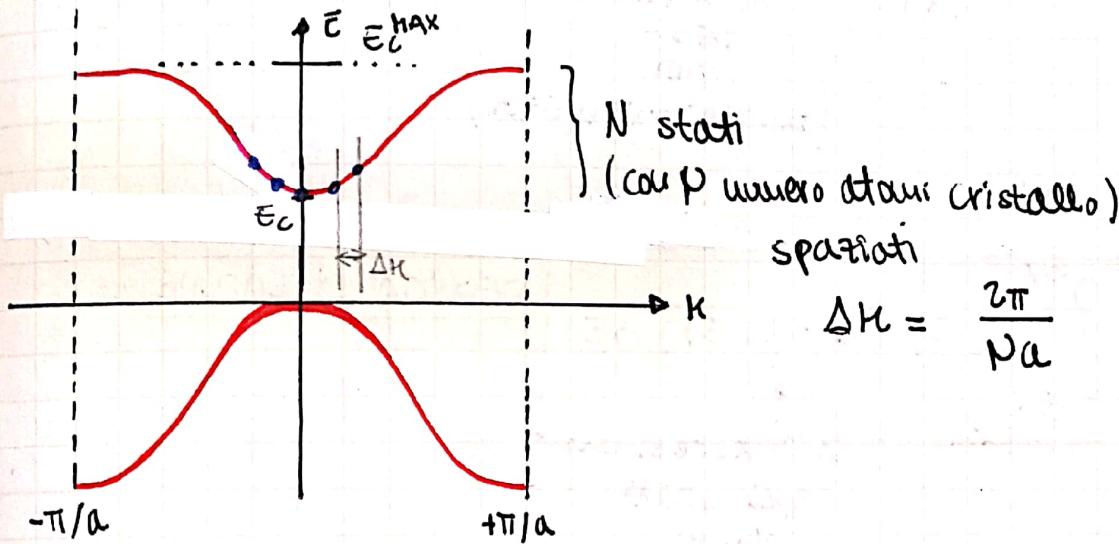
sia la densità di corrente:

$$j_n = -q n v_n$$

velocità  
di drift  
(teoria semiclassica)  
Drift

$$v = \mu F$$

come calcolare la densità di elettroni (o lacune)  $n$ ?



abbiamo  $N$  stati. Dobbiamo distinguere tra quelli possibili ' $N$ ' e quelli effettivi elettronici

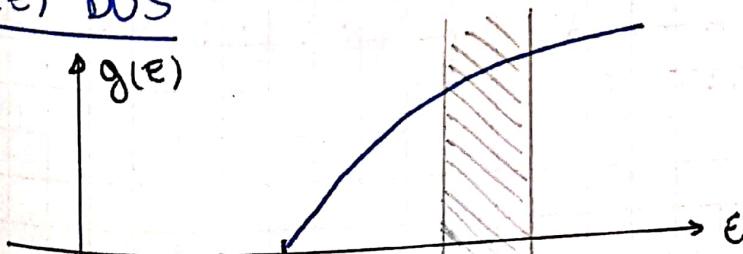
↳ il fattore che si passano è che gli effettivi sono il doppio dei possibili

↳ poiché oggi autostato moltiplica una **autofunzione di spin** che può essere di due tipi (per effetto della quantizzazione dello spin)

$\Rightarrow N$  stati ' $N$ ' (vetri d'acqua possibili)  
 $\Rightarrow 2N$  stati effettivi (spin su e spin giù)

Per calcolare  $N$  dobbiamo introdurre il concetto di DENSITA' DI STATI

$g(E)$  DOS



$g(E)dE$  a dice quanti stati ci sono tra  $E$  e  $E+dE$

( $E_C$ : bandgap)

la  $g(E)$  avrà dimensione

$$g(E) \rightarrow \frac{\# \text{ STATI}}{\text{eV} \cdot \text{cm}^3}$$

ottenuta la densità di stati  $g(E)$ , allora la densità di e-

$$n = \int_{E_c}^{E_c + \Delta E} g(E) \cdot f(E) dE$$

DENSITÀ DI STATI

PROBABILITÀ DI OCCUPAZIONE DEGLI STATI  
(distribuzione di Fermi)

DEPSITA' DI ELETTRONI

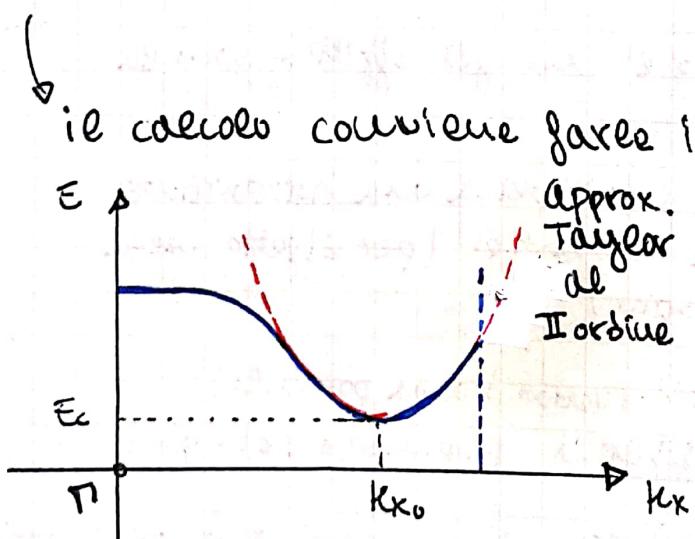
Analogamente:

$$P = \int_{E_{V_{\min}}}^{E_V} g(E) (1 - f(E)) dE$$

ct interessante gli stati vuoti  
( $1 - \text{prob. stato pieno}$ )

DEPSITA' DI LACUNE

da cui otteriamo le corrette di elettroni e lacune.



$$\bar{E} = E_c + \frac{\hbar^2}{2m^*} k^2$$

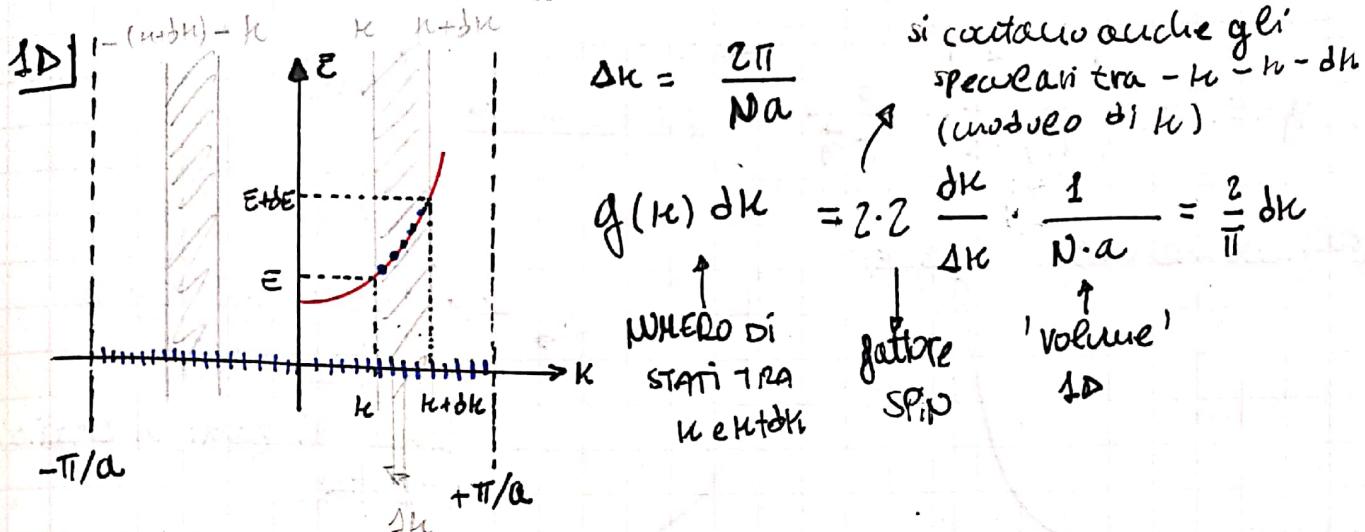
si usa un solo K

$$K^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2$$

il minimo si trova in  $K=0$  allora per GaAs l'approx. è corretta. Per il silicio, germanio in teoria no, ma per i primi conti ipotizziamo sì. Per la banda di valenza:

$$E = E_V - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_p^*}$$

Calcoliamo la densità di stati:



da cui

$$g(k) = \frac{2}{\pi}$$

la distribuzione degli stati è costante

ma a noi serve  $g(E)$ :

$$g(E) dE = g(k) dk$$

(il numero di stati è quello.  
fissati  $k$  e  $k + \Delta k$  corrispondono  
dei  $E$  e  $E + \Delta E$ )

dunque

$$g(E) = g(k) \cdot \frac{1}{\frac{dE}{dk}}$$

dove

$$\frac{dE}{dk} = \frac{d}{dk} \left( E_C + \frac{\hbar^2}{2m_n^*} k^2 \right) = \frac{\hbar^2}{m_n^*} k$$

$$k = \frac{\sqrt{2m_n^*(E - E_C)}}{\hbar}$$

$$\Rightarrow g(E) = \frac{g(k)}{\frac{dE}{dk}} = \frac{2}{\pi} \cdot \frac{m_n^* \hbar}{\hbar^2} \frac{1}{\sqrt{2m_n^*(E - E_C)}} = \sqrt{\frac{2m_n^*}{E - E_C}} \cdot \frac{1}{\pi \hbar}$$

$$\Rightarrow g(E) = \sqrt{\frac{2m_n^*}{E - E_C}} \cdot \frac{1}{\pi \hbar}$$

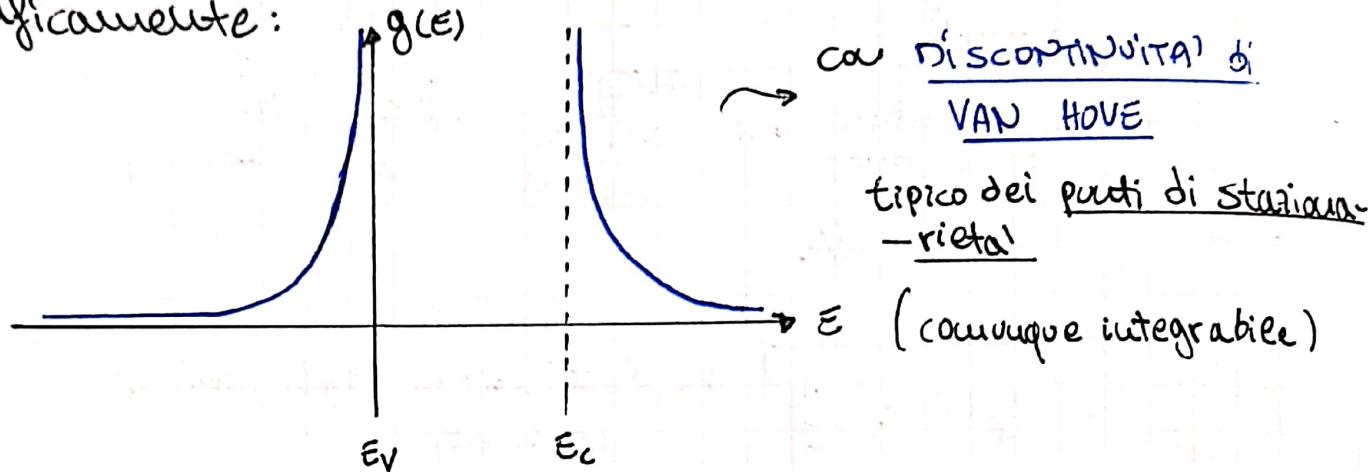
DENSITÀ DI STATI  
per elettroni (1D)

per le lacune:

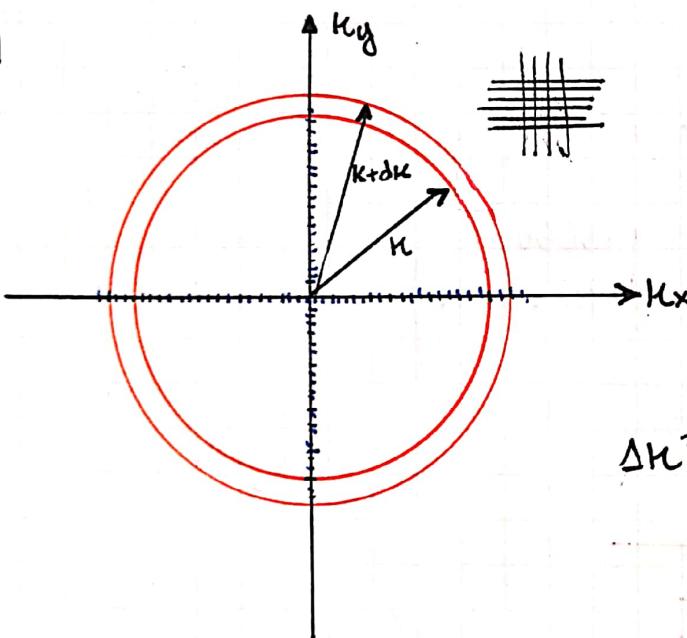
$$g(E) = \sqrt{\frac{2\omega_n^*}{E_V - E}} \cdot \frac{1}{\pi \theta}$$

DENSITA' DI STATI  
per la LACUNA (1D)

graficamente:



2D



$$k_x = \frac{2\pi}{a} \cdot \frac{M_x}{N} = \Delta k M_x \text{ con } M_x = 0, 1, 2, \dots, \frac{N}{2}$$

$$k_y = \frac{2\pi}{a} \frac{M_y}{N} = \Delta k M_y$$

si ha una griglia di area minima  
 $\Delta k^2$

$$\Delta k^2 = \left(\frac{2\pi}{Na}\right)^2$$

SPAZIO SINGOLO STATO  
 (oggetto con la sua  
 area di competenza)

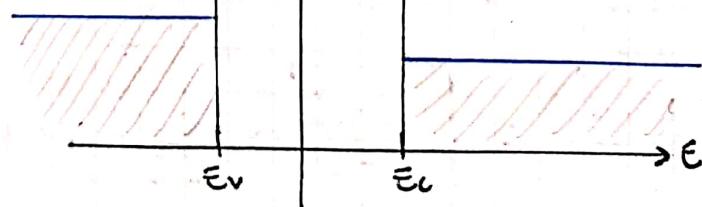
Allora

$$g(k) dk = \frac{2\pi k dk}{(\Delta k^2)} \cdot 2 \cdot \frac{1}{(\frac{Na}{2})^2} = \frac{k}{\pi} dk$$

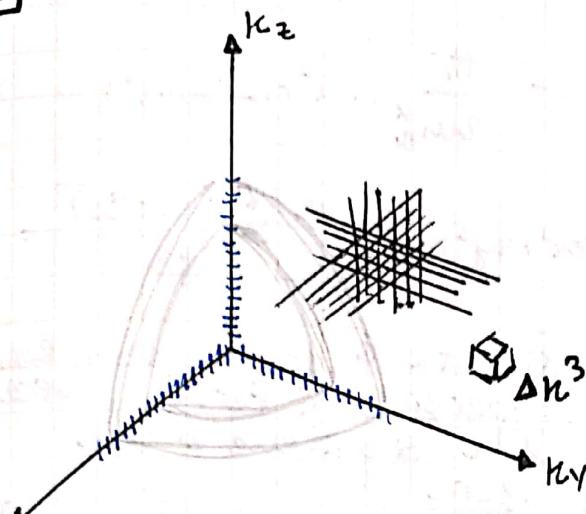
spin      area

$$g(E) = g(k) \cdot \frac{1}{dE/dk} = \frac{k}{\pi} \cdot \frac{\omega_n^*}{\theta^2 k} = \frac{\omega_n^*}{\pi \theta^2}$$

DENSITA' DI STATI  
per elettroni (2D)



3D



$$\Delta k^3 = \left(\frac{2\pi}{Na}\right)^3$$

sfera di raggio  $k$  e  $k+dk$

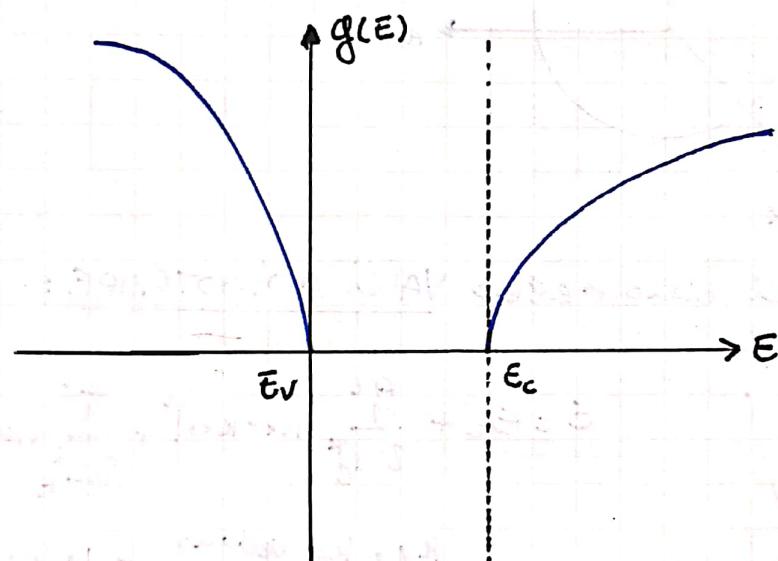
$$g(k) dk = \frac{4\pi k^2 dk}{\left(\frac{2\pi}{Na}\right)^3} \cdot \frac{1}{(Na)^3} = \frac{k^2}{\pi^2} dk$$

↑  
volume

da cui  $g(E) = g(k) \left(\frac{\partial E}{\partial k}\right)^{-1} = \frac{k^2}{\pi^2} \cdot \frac{m_n^*}{\hbar^2 k} = \frac{2}{2\pi^2 \hbar^3} \cdot \frac{m_n^*}{\hbar} \cdot \sqrt{2m_n^*(E-E_c)}$

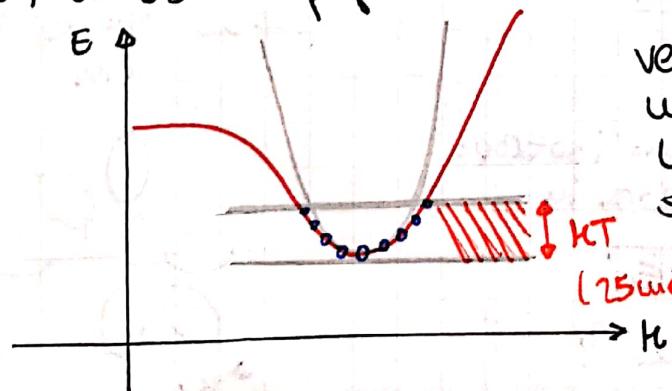
$$g(E) = \frac{(2m_n^*)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E - E_c}$$

DENSITÀ DI STATI per
elettroni



DISCONTINUITÀ  
DI VAN HOVE  
(DERIVATA PRIMA discontinua)

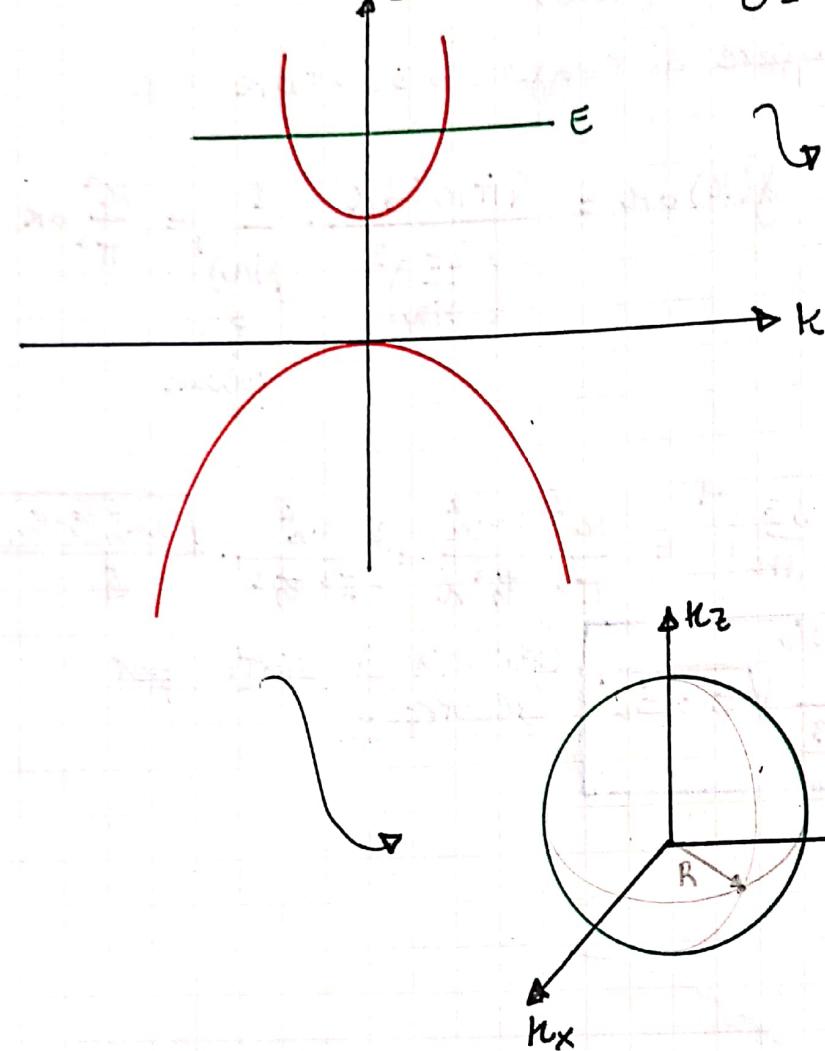
Tutto questo calcolo è stato fatto con APPROXIMAZIONE PARABOLICA, dato che le valli di solito sono le prime (e spesso le uniche) a essere popolate.



vergono popolati gli stati nei primi  $kT$  [eV].  
Le non idealità della parabola si possono notare solo con l'applicazione di grandi campi.

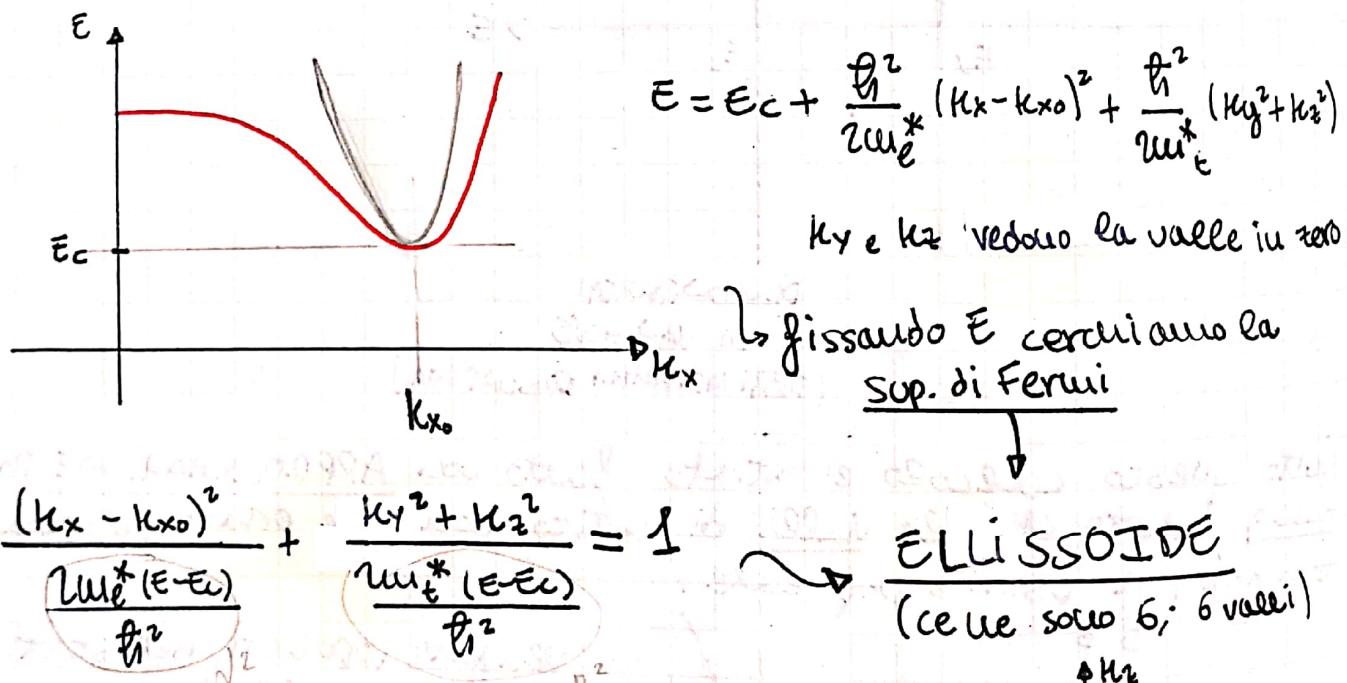
Modello parabolico (semplice, ISOTROPO):

$$E = E_C + \frac{\hbar^2}{2m^*} (\kappa_x^2 + \kappa_y^2 + \kappa_z^2)$$



fissata E la superficie di Fermi che si ottiene e' una sfera (luogo dei punti  $\kappa_x, \kappa_y, \kappa_z$  a) pari energia

nel caso del silicio ci sono delle VALLI ANISOTROPE:



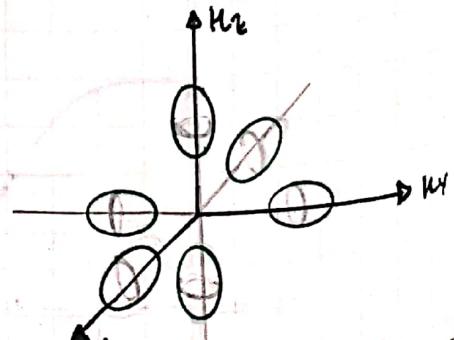
$\kappa_y$  e  $\kappa_z$  vedono la valle in zero  
fissando E cerchiamo la sup. di Fermi

ELLISSOIDE  
(c'è uno solo 6; 6 valli)

Se avranno un minimo isolato  
abbiano più minimi, allora in

$$g = \frac{(2m^*)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^2} \sqrt{E - E_C}$$

Quale massa effettiva mettiamo?



mettiamo questa che EGUALIA il volume contenuto nei 6 ellissoidi e quella superficie di Fermi sferica (ad un determinato livello di energia)

→ perché il volume è proporzionale al numero di stati nello spazio

Possiamo dunque ricavare la massa DOS da inserire in

$$g = \frac{(2m_n^*)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^2} \sqrt{E - E_c}$$

per ricavare la DENSITÀ DI STATI del silicio.

VOLUME SFERA

VOLUME ELLISOIDI

$$\frac{4}{3}\pi \left( \frac{2m_n^*(E-E_c)}{\hbar^2} \right)^{3/2} = g \frac{4}{3}\pi \left( \frac{2m_e^*(E-E_c)}{\hbar^2} \right)^{3/2} \frac{2m_e^*(E-E_c)}{\hbar^2}$$

↑  
degenerazioni  
(6 per Si)  
(4 per Ge)

$$m_n^{3/2} = g m_e^{3/2} m_t$$

MASSA DOS (Density of States)  
in banda di conduzione

è la massa da usare per il calcolo della densità di stati e di elettroni (solo PER QUESTO!)

$$\rightarrow \text{dentro } g(E) = \frac{(2m_n^*)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E - E_c}$$

(espressione simile per la curva)

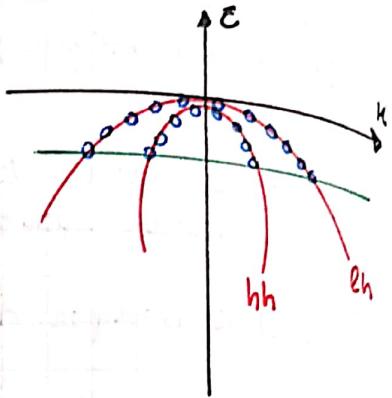
Alcuni valori tipici sono:

	$m_e^*$	$m_t^*$	$g$	$m_n^{3/2}$ DOS
Si	1,519	0,0815	4	0,553
Ge	0,916	0,19	6	1,06
GaAs	↓	↓	1	0,067

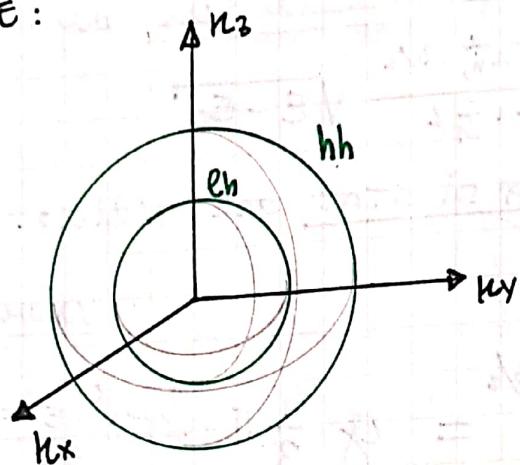
in BANDA di VALENZA ci sono due massimi; dobbiamo usare

$W_{hh}^*$   
MASSA HEAVY HOLE  
 (LACUNA PESANTE)

$W_{lh}^*$   
MASSA LIGHT HOLE  
 (LACUNA LEGGERA)



fissata E:



Ovvero:

$$E = E_V - \frac{\hbar^2}{m_p^*} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$$

$$\frac{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2}{\frac{m_p^*(E_V - E)}{\hbar^2}} = 1$$

eguagli i volumi:

$$\frac{4}{3}\pi \left( \frac{m_p^*(E_V - E)}{\hbar^2} \right)^{3/2} = \frac{4}{3}\pi \left( \frac{m_{lh}^*(E_V - E)}{\hbar^2} \right)^{3/2} + \frac{4}{3}\pi \left( \frac{m_{hh}^*(E_V - E)}{\hbar^2} \right)^{3/2}$$

$$m_p^{*3/2} = m_{lh}^{*3/2} + m_{hh}^{*3/2}$$

MASSA DOS  
 in banda di VALENZA

	$m_{hh}^*$	$m_{lh}^*$	$m_p^*$
Ge	0,347	0,043	0,357
Si	0,537	0,153	0,59
GaAs	0,51	0,082	0,532

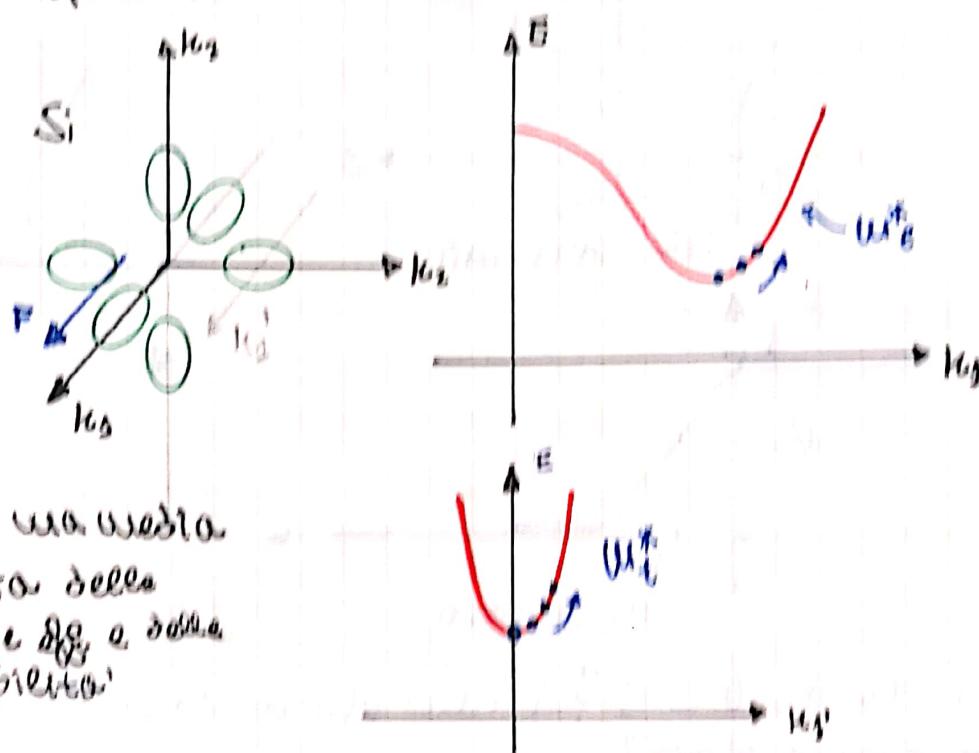
Altre relazioni fra cui era menzionata la massa effettiva  
era la MICHTA:

$$V_n = \mu_n F \quad \text{con} \quad \mu_n = \frac{q E_n}{m_n^*}$$

- se micromolto veloce e isotropo, d'altro  
un'altro valore è massima eff.

$$m_e^* = 0,067 m_0$$

- con anisotropia:



Si ha una media  
pesata delle  
masse degli z-dalle  
mobilità

Dunque:

$$\mu_n = \frac{2\mu_e + 4\mu_i}{6} \rightarrow \frac{1}{m_n^*} = \left( \frac{1}{m_e^*} + \frac{2}{m_i^*} \right) \frac{1}{3}$$

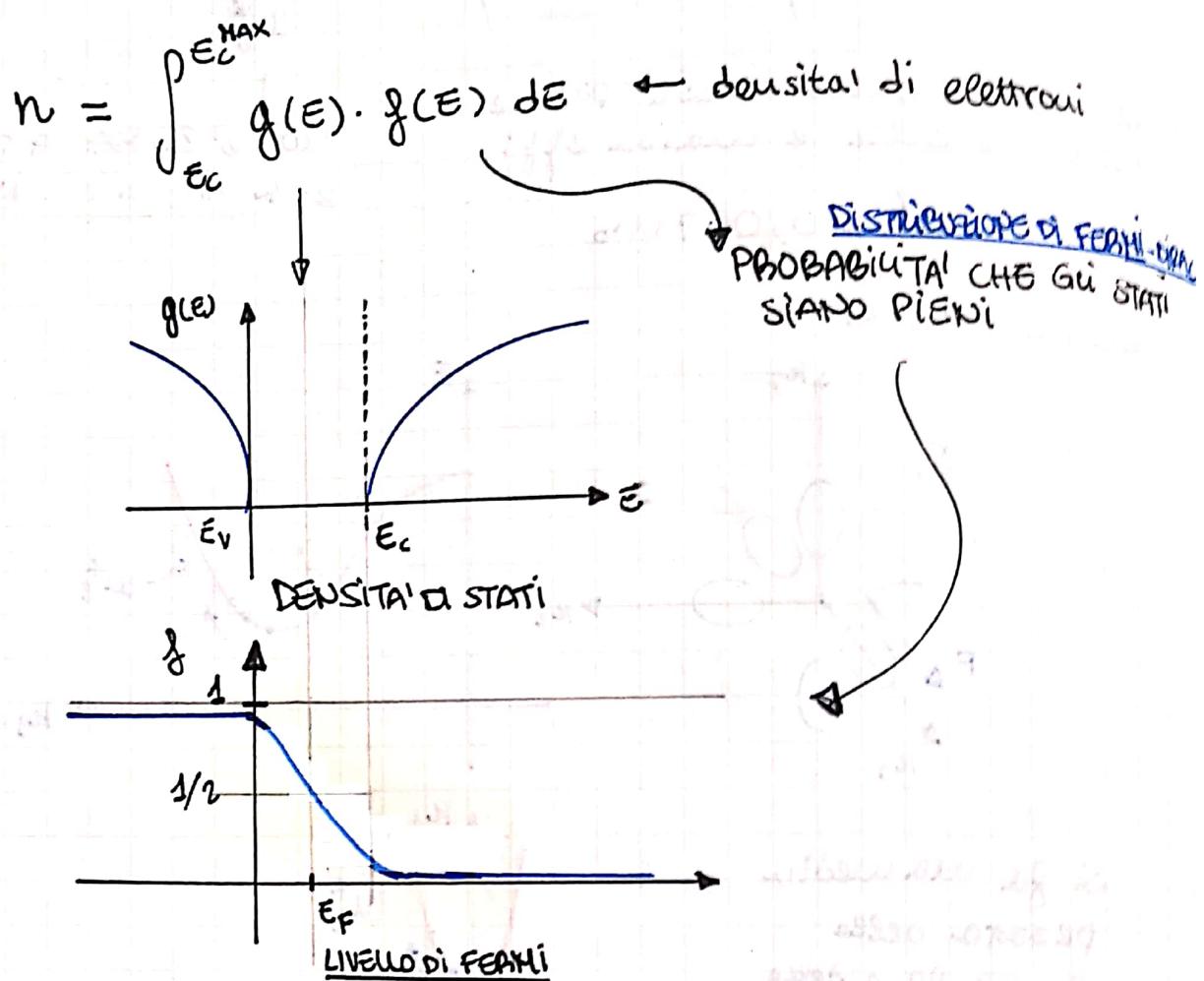
$$\Rightarrow m_e^* = \frac{3}{\frac{1}{m_e^*} + \frac{2}{m_i^*}} \rightarrow 0,06 \text{ (Si)}$$

MASSA DI CONDIZIONE  
(con ANISOTROPIE)

Ritorneremo però all'obiettivo di partenza:

$$j = -q n \mu_n F = \sigma_n F$$

con

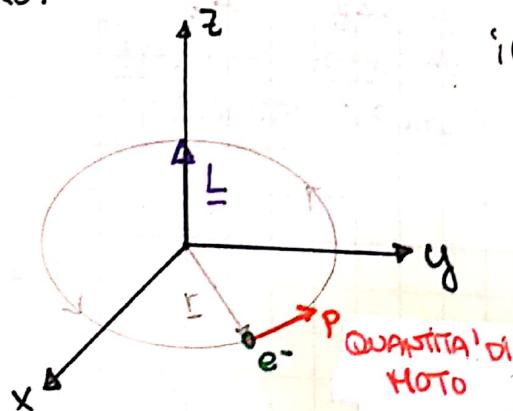


perché  $f(E)$  va da 0 a 1? Perché più di un elettrone non può occupare lo stesso stato?

per il princípio di esclusione di Pauli per cui al più un elettrone può occupare uno stato elettronico (un orbitale ad esempio)

↳ due elettroni per orbitale considerando che esso contempla i due stati con spin opposto

Cosa è lo SPIN? Supponiamo un elettrone orbitante attorno al centro:



il momento angolare si conserva

$$\underline{L} = \underline{r} \times \underline{p}$$

sia nella meccanica quantistica, dove è anche quantizzato, che nella fisica classica.

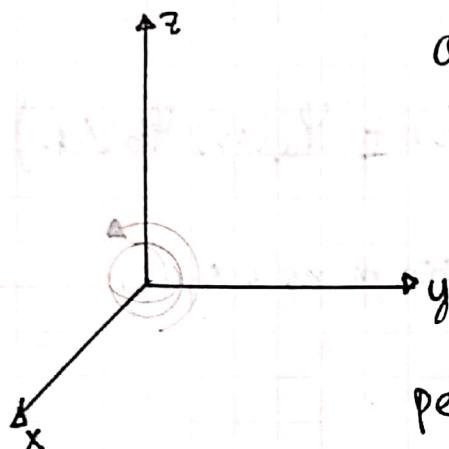
nella meccanica quantistica dunque  $L$  è quantizzato:

$$|L|^2 = \hbar^2 l(l+1) \quad \text{con } l=0 \text{ orbitale s}$$
$$\begin{array}{lll} l=1 & " & p \\ l=2 & " & d \\ l=3 & " & f \end{array}$$

c'è poi una quantizzazione sulla proiezione lungo l'asse:

$$L_z = \hbar m_l \quad \text{con } m_l = 0, \pm 1, \dots, \pm l$$

supponendo ora una particella; questa ruota su se stessa:



adesso anche il momento di spin ha segue le stesse leggi di quantizzazione.

$$|S|^2 = \hbar^2 s(s+1)$$

$$S_z = \hbar m_s \quad \text{con } m_s = 0, \pm 1, \dots, \pm s$$

per l'elettrone:

SEMIINTERO

$$s = \frac{1}{2}$$

$$\rightarrow m_s = \pm \frac{1}{2}$$

Pertanto il momento proiettato

angolare

può assumere valori  $\pm \frac{1}{2}$  (rotazione in un senso o nell'altro)  $\left\{ \begin{array}{l} \text{devono essere} \\ \text{distanziati} \end{array} \right.$

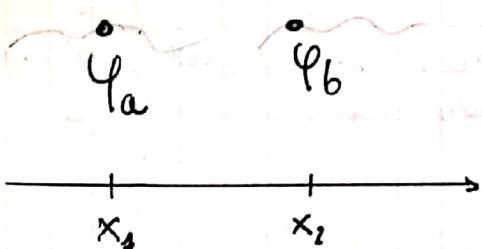
di  $\frac{1}{2}$

Tutte le particelle che obbediscono a tali leggi di quantizzazione di spin e principio di esclusione di Pauli sono detti FERMIONI (elettroni, positroni, protoni, neutrini, etc...).

Poi ci sono i BOSONI con spin intero (es. fotoni) descritti da BOSE-EINSTEIN.

Avere spin intero o semiintero cambia notevolmente le proprietà delle particelle, soprattutto dal punto di vista della distribuzione energetica.

Immaginiamo un sistema di due particelle, ad esempio due elettroni, in due stati differenti:



questi due elettroni sono indistinguibili: non c'è nessun modo di etichettarle. Se facciamo una misura non sappiamo quale delle due abbiano misurato.

possiamo scrivere la funzione d'onda complessifica dei due elettroni

$$\Psi(x_1, x_2) = \varphi_a(x_1) \cdot \varphi_b(x_2)$$

ma dato che sono indistinguibili, vorremo che scambiando i due elettroni,  $|\Psi|^2$  non cambi:

$$|\Psi(x_1, x_2)|^2 = |\Psi(x_2, x_1)|^2$$

due particelle indistinguibili  
(invarianza per scambio)

$$\Rightarrow \Psi(x_1, x_2) = \pm \Psi(x_2, x_1)$$

dunque

$$\Psi(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_a(x_1) \varphi_b(x_2) \pm \varphi_a(x_2) \varphi_b(x_1))$$

invariante per scambio di  $x_1$  e  $x_2$   
antisimmetrica

Se

BOSONI  
• SPIN INTEGO  $\rightarrow$  segno +  $\rightarrow$  simmetria

FERMISSI  
• SPIN SEMIINTEGO  $\rightarrow$  segno -  $\rightarrow$  antisimmetria

se le due particelle hanno stesso stato  $\varphi_a$ , si ha:

$$\Psi_{aa}(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_a(x_1) \varphi_a(x_2) \pm \varphi_a(x_2) \varphi_a(x_1))$$

per i FERMISSI (elettroni) si prende il -  
dunque è uguale

$\rightarrow$  due elettroni (fermioni) non possono essere nello stesso stato

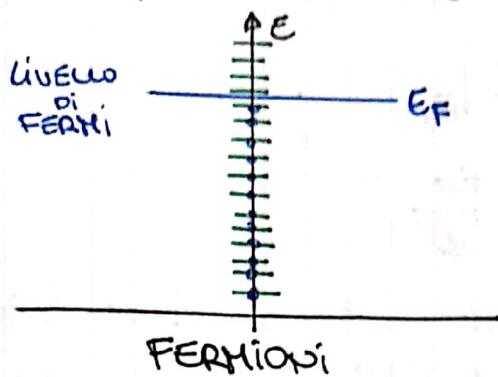
### Princípio di Esclusione di PAULI

valido che lo stato in analisi sia l'orbitale

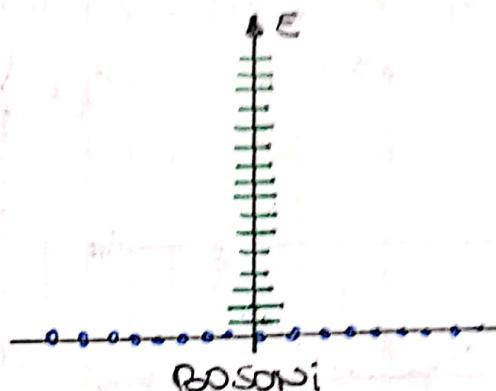
• lo spin, etc...

con i BOSONI ciò non accade. Un numero arbitrario di bosoni possono occupare lo stesso stato e questo energetico.

alla temperatura  $T = 0 \text{ K}$ :



il livello di Fermi ci dice fino a che livello energetico si dispongono gli stessi alla temperatura di  $0 \text{ K}$

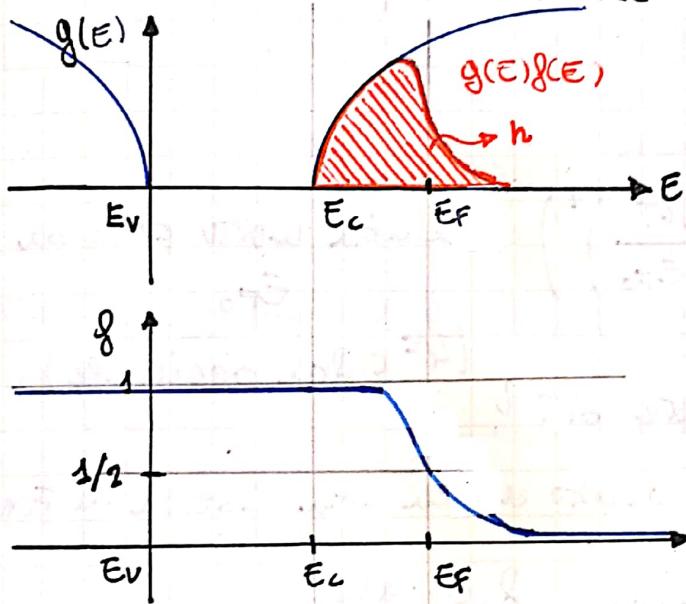


a  $T = 0 \text{ K}$  i bosoni si dispongono tutti su livello minimo di energia

Possiamo ora finalmente calcolare la densità di elettroni

### METALLI

il livello di Fermi è nella banda di conduzione



(indica dove la distribuzione di Fermi è  $1/2$ )

$$n = \int_{E_C}^{E_C^{\max}} \frac{(2m_n^*)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E - E_C} \cdot \frac{1}{e^{\frac{E - E_F}{kT}} + 1} dE$$

$g(E)$        $f(E)$

non integrabile, ma calcolabile numericamente

a  $T = 0 \text{ K}$

$$f(E) \rightarrow \begin{cases} 1 & \text{se } E < E_F \\ 0 & \text{se } E > E_F \end{cases}$$

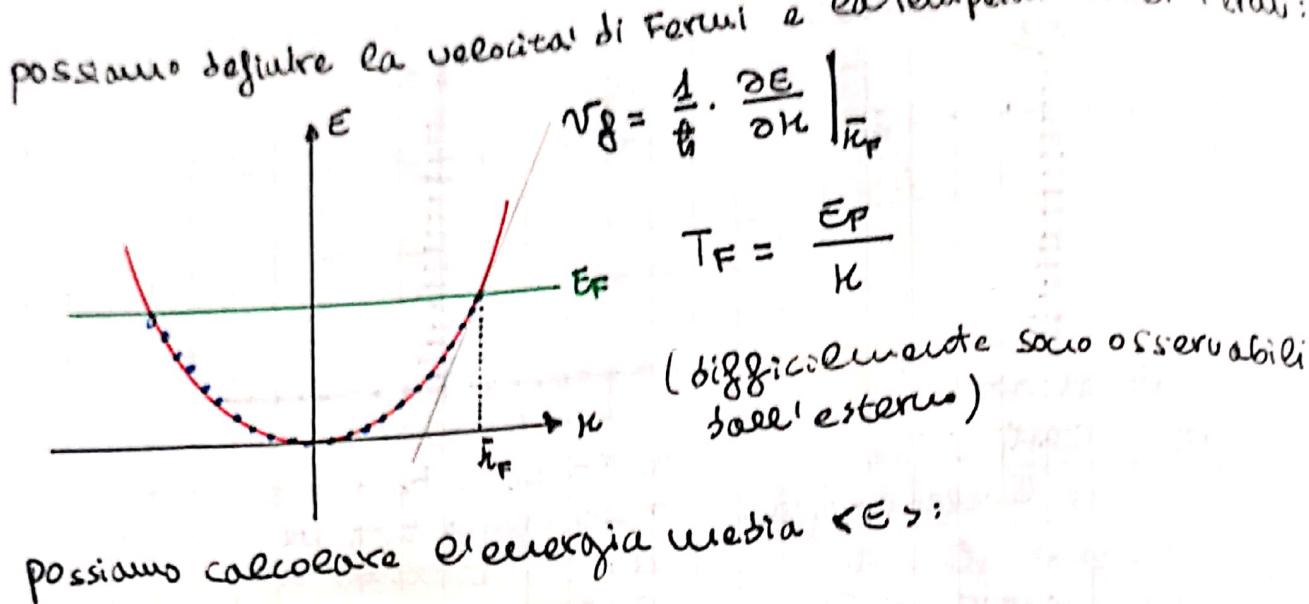
$$n \approx \int_{E_C}^{E_F} \frac{(2m_n^*)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E - E_C} dE = \frac{(2m_n^*)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \cdot \frac{2}{3} \left[ (E - E_C)^{3/2} \right]_{E_C}^{E_F}$$

$$= \frac{(2m_n^*)^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3} (E_F - E_C)^{3/2}$$

Spesso però si usa la relazione inversa  $E_F(n)$  perché  $n$  si ricava dalla DENSITÀ ATOMICA per la VALENZA del METALLO (elettroni ceduti) (per es. Li, Na, K hanno 3 elettroni di valenza)

$$E_F = \frac{(3\pi^2 n)^{2/3} \hbar^2}{2m_n^*}$$

Livello di Fermi a  $0 \text{ K}$   
(data la densità di elettroni  $n$ )



$$\langle E \rangle = \frac{\int_0^{E_F} \frac{(2m\hbar^2)^{1/2}}{2\pi^2 \hbar^3} E^{3/2} dE}{\frac{(2m\hbar^2)^{1/2} E_F^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3}} = \frac{\frac{2}{5} E_F^{5/2}}{E_F^{3/2}} \cdot \frac{3}{2} = \frac{3}{5} E_F$$

Vale inoltre (si dimostra):

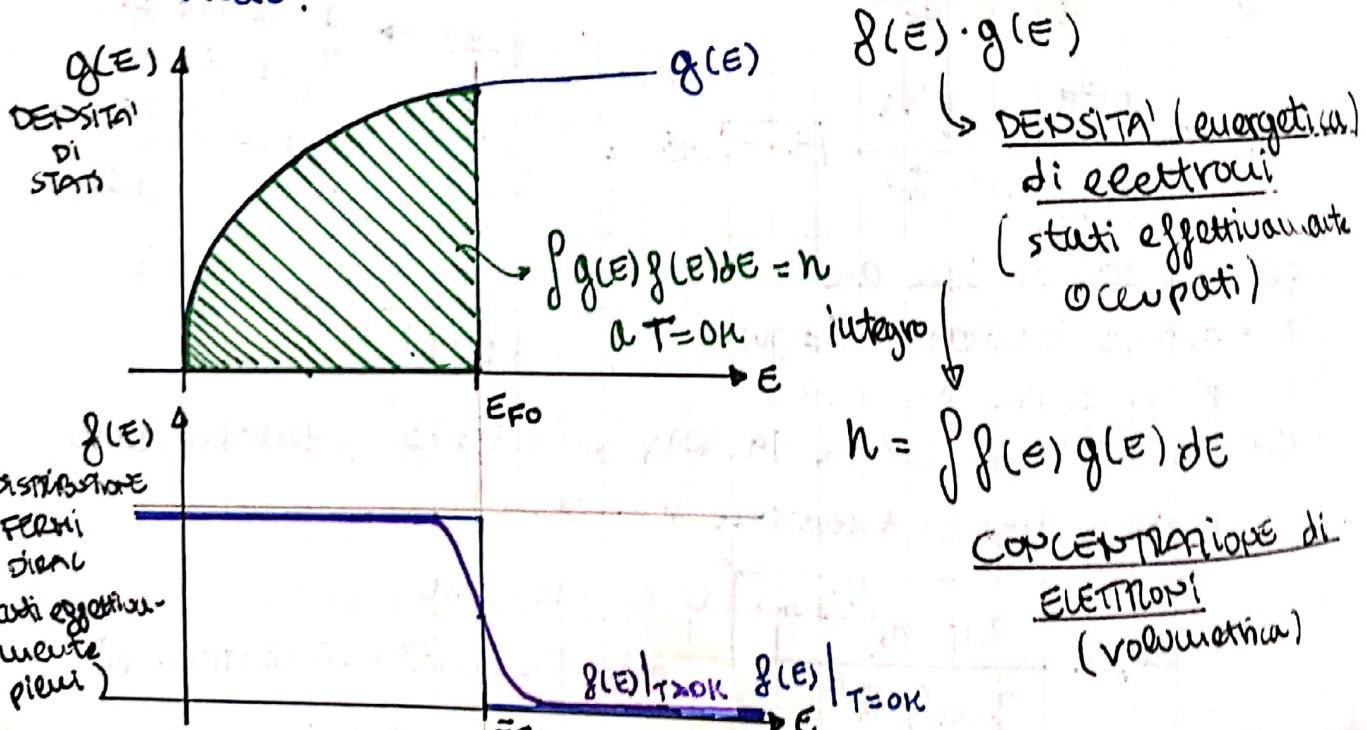
$$E_F(T) = E_{F0} \left( 1 - \frac{\pi^2}{12} \left( \frac{KT}{E_{F0}} \right)^2 \right)$$

cambia molto poco da  $E_{F0}$

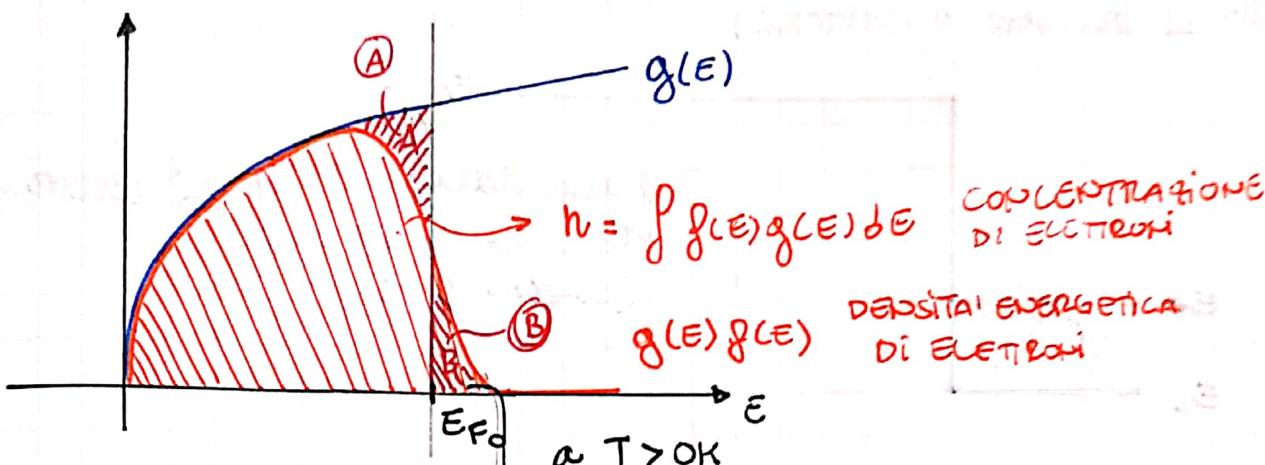
(4^a cifra decimale)

perché diminuisce all'aumentare di  $T^2$ ,

↳ ie il modello di Fermi viene usato nella statistica di Fermi - Dirac.



aumentando  $T$ :



a  $T > 0K$

→ Alcuni stati si svuotano (a 'bassa' energia) e si riempiono gli stati ad alta energia.

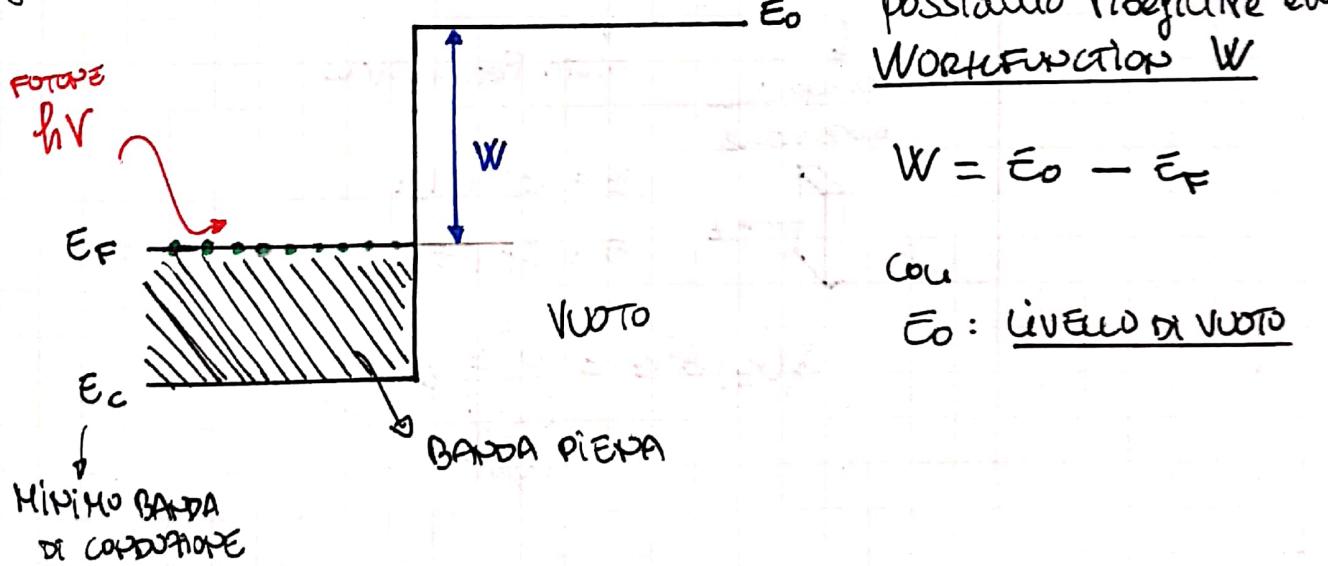
La transizione in  $f(E)$  avviene in modo 'simmetrico'

Se il livello di Fermi non cambiasse l'area B sarebbe maggiore dell'area A poiché la funzione  $e^{-x}$  è crescente.

Ma ciò non può accadere poiché la concentrazione di elettroni si deve conservare.

Pertanto per 'equilibrare' le due aree  $E_F$  deve arretrare.

Noto il crollo del livello di Fermi, possiamo osservare l'effetto fotoelettrico:



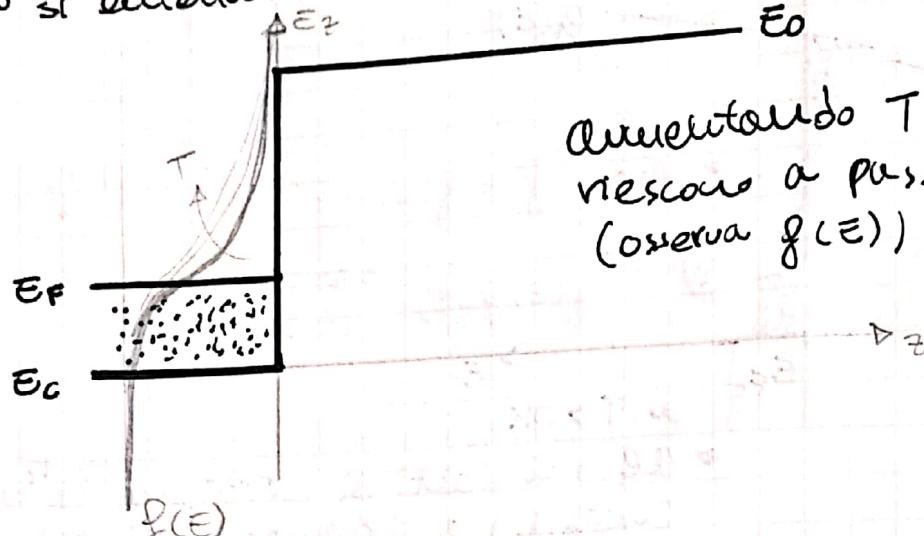
possiamo ridefinire la Workfunction  $W$

$$W = E_0 - E_F$$

Così

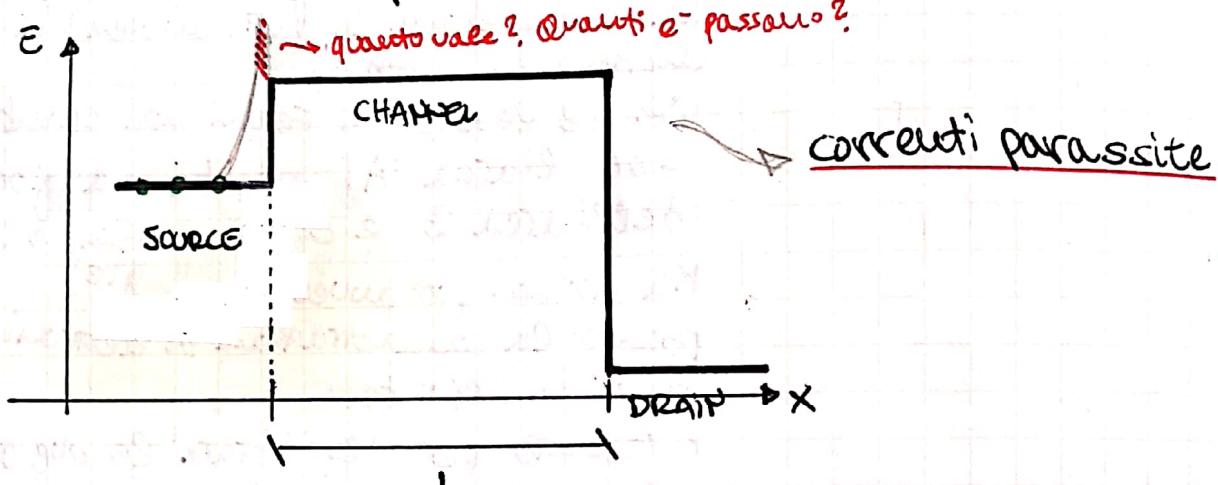
$E_0$ : LIVELLO DI VUOTO

Un altro effetto è l'EFFETTO TERMOIONICO (se scalando le  
metallo si dimetano elettroni)



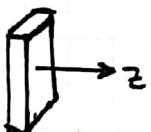
Aumentando  $T$  alcuni elettroni riescono a passare  
(osserva  $f(E)$ )

cioè si utilizza ad esempio nei TRAP SISTOR:



$$j_{TI} = -q n \nabla V_z = -2q \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} f(k) V_z(k)$$

lungo una  
direzione



distr. Fermi-Dirac

$$k = k_{\parallel} + k_z$$

$$E = E_{\parallel} + E_z$$

$$f(k) d^3 k = \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} 2 \cdot \frac{1}{(2\pi)^3}$$

$$= -2q \int \frac{d^2 k_{\parallel}}{(2\pi)^3} dk_z \cdot \frac{1}{\hbar} \cdot \frac{dE_z}{dk_z} \cdot \frac{1}{e^{E_z + E_{\parallel} - E_F} + 1}$$

Velocità di  
gruppo lungo?

$$= -\frac{2q}{h} \int \frac{2\pi k_{\parallel} dk_{\parallel}}{(2\pi)^3} \int_{E_0}^{\infty} dE_z \cdot \underbrace{\frac{1}{e^{\frac{E_z - (E_F - E_z)}{kT}} + 1}}_f$$

$$= -\frac{2q kT}{h (2\pi)^2} \int k_{\parallel} dk_{\parallel} \int_{E_0}^{\infty} dx \frac{1}{e^x + 1}$$

$$= -\frac{2q kT}{h (2\pi)^2} \cdot \frac{w^*}{h^2} \int dE_{\parallel} \ln \left( e^{-\frac{E_{\parallel} - (E_F - E_{\parallel})}{kT}} + 1 \right)$$

$$E_{\parallel} = \frac{h^2}{2m^*} k_{\parallel}^2 \rightarrow dE_{\parallel} = \frac{h^2}{2mk^*} k_{\parallel} dk_{\parallel}$$

$$= -\frac{4\pi q kT w^*}{h^3} \int_0^{\infty} dE_{\parallel} \ln \left( e^{-\frac{W + E_{\parallel}}{kT}} + 1 \right)$$

$\ll 1$

$$j_{TI} \approx -\frac{4\pi w^* q (kT)^2}{h^3} e^{-\frac{W}{kT}}$$

$\ln(1+x) \approx x$  per  $x \rightarrow 0$

### CORRENTE TERZO-IOTICA (basital)

a livello pratico si usa:

$$I_{TI} = AT^2 e^{-\frac{W}{kT}}$$

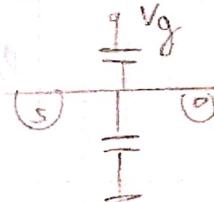
corrente  $\rightarrow$  area

LEGGE DI RICHARDSON

per  $T \uparrow I \uparrow$

FATTORE DI RIPARTIZIONE  
CAPACITUA

$$-\frac{q dV_G}{kT}$$



trasporto di corrente  
sotto soglia  
(parassite)  
vogliamo ridurre  
quei 60mV/sec!

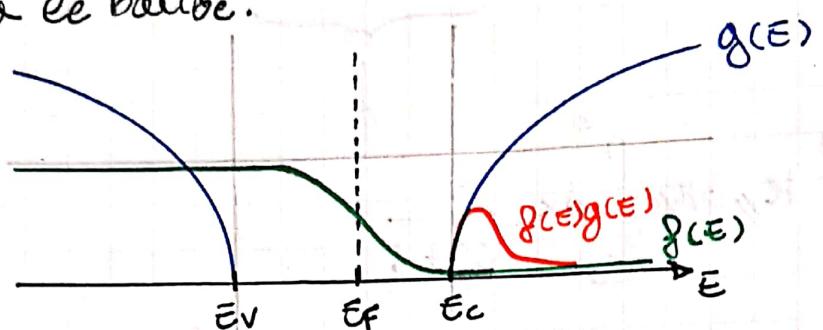
$$\ln I_D \propto \frac{q}{kT} V_G$$

per aumentare di fattore 10  $\ln I_D = \frac{q}{kT} \Delta V$

$$\Delta V = \frac{1}{2} 60 \text{ mV/sec.}$$

CALCOLO DELLA CONCENTRAZIONE DI ELETTRONI NEI SEMICONDUTTORI

I semiconduttori hanno livello di Fermi in mezzo al gap tra le bande.



$$n = \int_{E_C}^{E_C^{\text{MAX}}} g(E) g(E) dE$$

$$p = \int_{E_{V(\min)}}^{E_V} g(E) (1 - g(E)) dE$$

Sviluppando:

$$n = \int_{E_C}^{E_C^{\text{MAX}}} \frac{(2m^*)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E - E_C} \cdot \frac{1}{e^{\frac{E - E_F}{kT}} + 1} dE$$

(calcolabile numericamente)

Oltre alla APPROXIMAZIONE DI PARABOLICITÀ applichiamo ora una APPROSSIMAZIONE DI MAXWELL-BOLTZMANN che consiste nell'approssimare la distribuzione di Fermi-Dirac con un esponentiale (distribuzione di Maxwell-Boltzmann)

Se  $E_C - E_F \gg kT$  (almeno 3 volte) →

possiamo dire

$$\frac{1}{e^{\frac{E - E_F}{kT}} + 1} \rightarrow e^{-\frac{E - E_F}{kT}}$$

quando i livelli di Fermi non sono troppo vicini alla banda di conduzione.

(ad esempio se si droga troppo il semiconduttore)

dunque:

$$n = \frac{(2\mu_n^*)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty e^{-\frac{E-E_F}{kT}} \sqrt{\frac{E-E_F}{kT}} e^{-\frac{E-E_C}{kT}} d\frac{E-E_C}{kT} \left( \frac{kT}{\hbar^2} \right)^{3/2}$$

$$= \int_0^\infty x e^{-x^2} dx^2 [\dots] = - \int_0^\infty x d\bar{e}^{-x^2} [\dots] =$$

$\text{con } x = \sqrt{\frac{E-E_F}{kT}}$

$$= [\dots] \cdot \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

$$\Rightarrow n = \frac{1}{4\hbar^3} \left( \frac{2\mu_n^* kT}{\pi} \right)^{3/2} e^{-\frac{E_E-E_F}{kT}} = N_c e^{-\frac{E_E-E_F}{kT}}$$

COPERTRIZIONE

ELETTRONI

DENSITÀ DI SPARI  
EFFETTIVA

se compriemessimo tutti gli stati nel livello  $E_C$

Per le lawne:

$$P = \int_{-\infty}^{E_V} \frac{(2\mu_p^*)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E_V - E} \frac{e^{-\frac{E-E_F}{kT}} + 1 - 1}{e^{-\frac{E-E_F}{kT}} + 1} dE$$

$$= \frac{(2\mu_p^*)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \int \sqrt{E_V - E} \frac{1}{1 + e^{-\frac{E-E_F}{kT}}} dE$$

sotto le  
DENSITÀ DEI  
LIVELLI  
ENERGETICI  
vissuti intorno  
di  
 $E_C$

se  $-(E_V - E_F) \gg kT$  (almeno 3 volte) allora trascurare  $E_V$   
1 al denominatore

$$P = \frac{(2\mu_p^*)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \int_{-\infty}^{E_V} \sqrt{E_V - E} e^{-\frac{E-E_F}{kT}} dE$$

si ottiene:

$$P = \frac{1}{4\hbar^3} \left( \frac{2\mu_p^* kT}{\pi} \right)^{3/2} e^{-\frac{E_V-E_F}{kT}} = N_V e^{-\frac{E_V-E_F}{kT}}$$

COPERTRIZIONE DI VALENZE

immaginando di compiere  
tutta la banda di valen-  
ze in un unico livello

bisogna sempre controllare che le condizioni per la appross.  
di Maxwell - Boltzmann siano verificate (anche a posteriori).

Analizziamo ora due casi distinti:

SEMICONDUTTORI INTRINSECI  
sono SEMICONDUTTORI PURI, ovvero privi di drogante.

le lacune nascono poiché alcuni elettroni in banda di valenza sono saltati in banda di conduzione.

$$n = p$$

si generano tutte le lacune quanti sono gli elettroni di valenza che effettuano questo 'salto'.

Le reazioni viste valgono all'EQUILIBRIO (sia GENERAZIONE TERMICA)

Se  $n = p$ :

$$\frac{N_c e^{-\frac{E_c - E_F}{kT}}}{p_c} = \frac{N_v e^{\frac{E_v - E_F}{kT}}}{p_v}$$

$$-E_c + E_F = kT \ln \frac{N_v}{N_c} + E_v - E_F$$

$$E_F = \frac{E_c + E_v}{2} + \frac{kT}{2} \ln \frac{N_v}{N_c}$$

LIVELLO DI FERMI per  
SEMICONDUTTORI INTRINSECI

(elettroni e lacune si generano solo termicamente)

il livello di Fermi è esattamente in mezzo alla BANDGAP più un termine correttivo dipendente dalla temperatura e dalla densità di stati in banda di valenza e conduzione

il livello di Fermi di un semiconduttore intrinseco si detto LIVELLO INTRINSECO

$$E_i = \frac{E_c + E_v}{2} + \frac{3}{4} \ln \frac{W_p^*}{W_n^*}$$

LIVELLO INTRINSECO

Osserviamo Ge, Si, GaAs: (ideale) mezzo gap

	BANDGAP EG [eV]	E <sub>C</sub> - E <sub>F</sub>	N <sub>C</sub> [cm <sup>-3</sup> ]	N <sub>V</sub> [cm <sup>-3</sup> ]	n <sub>i</sub> [cm <sup>-3</sup> ]
Ge	0,66	- 3,68 meV	1,03 · 10 <sup>19</sup>	5,35 · 10 <sup>18</sup>	2,15 · 10 <sup>13</sup>
Si	1,12	- 3,57 meV	3,22 · 10 <sup>19</sup>	1,83 · 10 <sup>19</sup>	10 <sup>10</sup>
GaAs	1,42	+ 37,5 meV	4,2 · 10 <sup>17</sup>	9,52 · 10 <sup>18</sup>	2,4 · 10 <sup>6</sup>

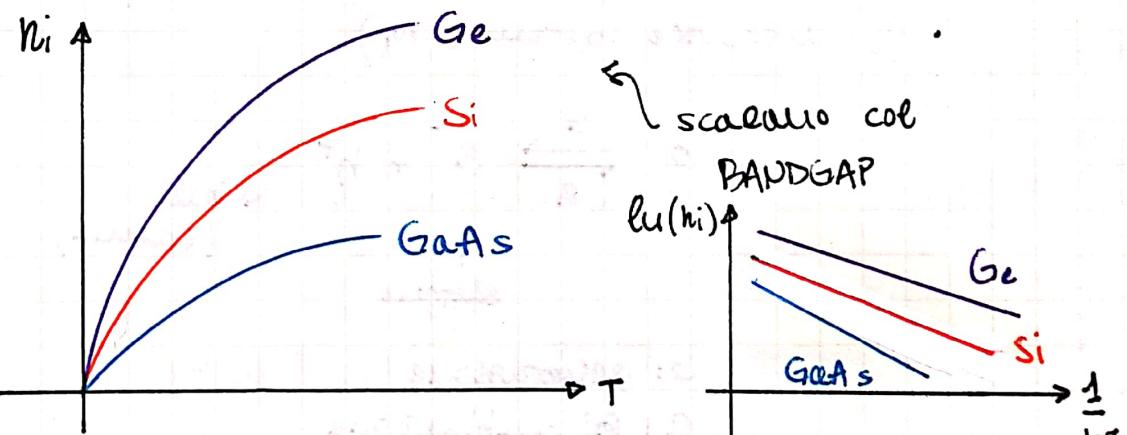
↑  
termine  
correttivo  
rispetto a  
mezzo bandgap  
(livello di Fermi ideale)

se facciamo il prodotto N<sub>P</sub>:

$$N_P = N_C e^{-\frac{E_C - E_F}{kT}} N_V e^{\frac{E_V - E_F}{kT}} = n_i^2 \quad \begin{array}{l} \text{concentrazione} \\ \text{intrinseca} \\ \text{NON DIPENDE} \\ \text{DA } E_F \end{array}$$

$$n_i = \sqrt{N_C N_V} e^{-\frac{E_C - E_V}{2kT}} \quad \begin{array}{l} \text{CONCENTRAZIONE INTRINSECA} \\ n_i \text{ all'equilibrio di un} \\ \text{semiconduttore intrinseco} \end{array}$$

indipendente dal livello di Fermi  
molto dipendente dalla temperatura T



per applicazioni di potenza con grandi oscillazioni di temperatura vogliamo che n<sub>i</sub> rimanga lontana dalla concentrazione di droganti.

↪ si preferisce il GaAs (rispetto a Si, Ge) per la bassa n<sub>i</sub>.

Altri semiconduttori usati sono:

GaN SiC ZnO C

introdotti  $N_i$  e  $E_i$ , possiamo ridefinire alcune quantità:

$$n = N_c e^{-\frac{E_g - E_F}{kT}} = N_c e^{-\frac{E_L - E_i}{kT}} e^{-\frac{E_i - E_F}{kT}}$$

$$\hookrightarrow n = n_i e^{-\frac{E_i - E_F}{kT}}$$

CONCENTRAZIONE DI ELETTRONI

utile per semicond. non intrinseci.

Se è intrinseco  $E_i = E_F \rightarrow n = n_i$

Analogamente:

$$\hookrightarrow p = n_i e^{\frac{E_i - E_F}{kT}}$$

CONCENTRAZIONE DI LACUNE

Notiamo che  $n_p = n_i^2$  è una costante indipendente dal livello di Fermi:

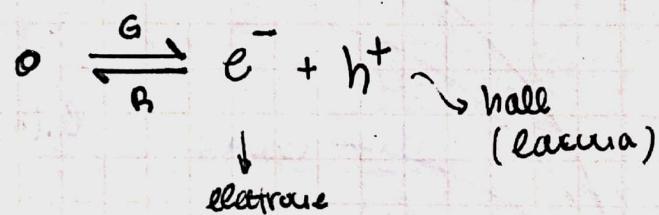
$$n_p = N_c N_v e^{-\frac{E_g}{kT}}$$

LEGGE DI ATTRAZIONE DI MASSA

(allo equilibrio)

con  $E_g$ : BANNOV

Se per generazione termica si generano elettroni e lacune queste possono anche ricombinarsi fino a raggiungere l'equilibrio (mantenere costante  $n_p$ )



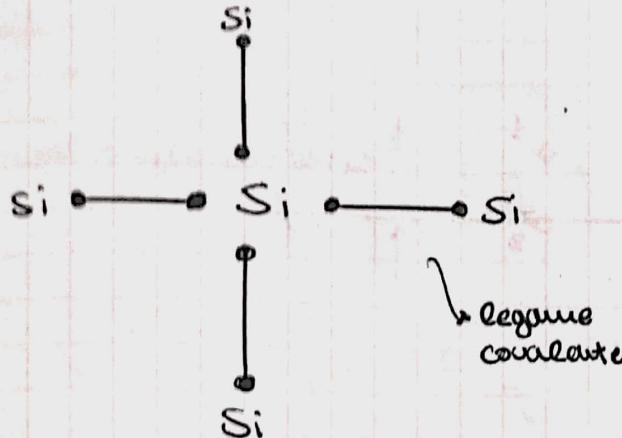
G: generazione

B: ricombinazione

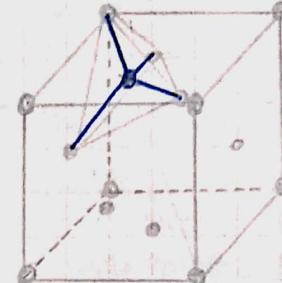
Sfruttare la costante  $n_i^2$  svelterà i calcoli!

## SEMICONDUTTORI ESTERINSECI

Cercheremo di comprendere l'effetto del DROGGAGGIO sui semiconduttori.



il silicio ha una struttura FCC con base di due atomi

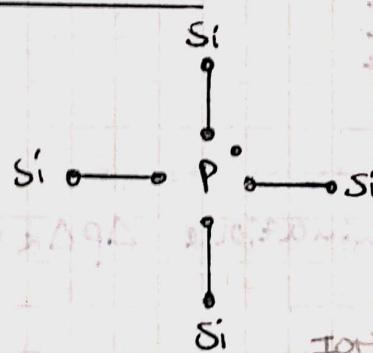


(struttura tetraedrica)

il silicio condivide i propri 4 atomi di valenza con altri 4 atomi di silicio per raggiungere l'ottetto.

Possiamo introdurre diversi tipi di droggaggio:

### FOSFORO P:



#### - DROGGAGGIO DOPORE -

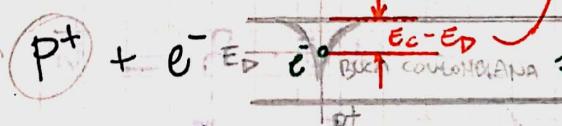
il fosforo ha 5 elettronni di valenza.

Se si legasse ad altri tre atomi di silicio, l'elettrone extra puo':

#### - RESTARE VINCOLATO ALL'ATOMO d'origine di fosforo per INTERAZIONE COULOMBIANA

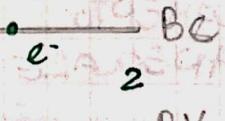
ENERGIA DI  
IONIZZAZIONE

per strappare  
BC e'  
all'atomo



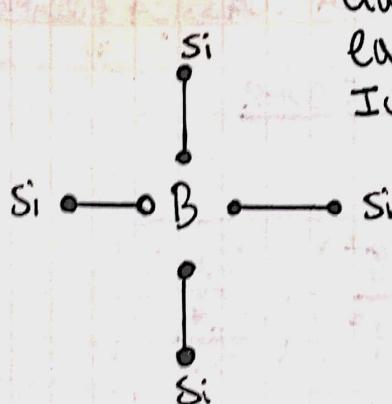
#### - SEGARSI DAL FOSFORO PER ANDARE IN BANDA DI CONDUZIONE

lasciando  
una CARICA  
FISSA POSITIVA



#### - DROGGAGGIO ACCETTORE -

### BORO B:

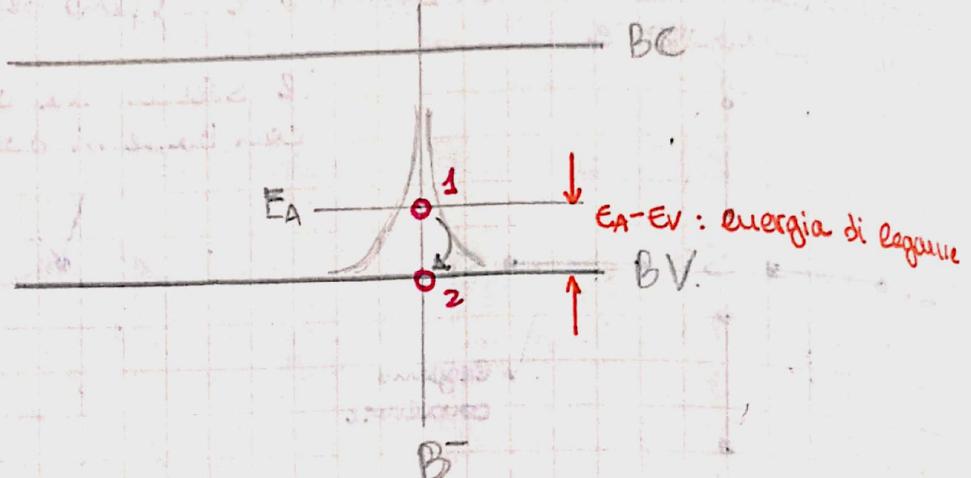


Ha 3 elettronini di valenza; non riesce a soddisfare la richiesta dei 4 atomi di silicio.  
Introduce dunque una lacuna (vacanza di elettrone).

RIMANERE LEGATA come carica positiva attorno a uno ione negativo (poiché un elettrone dalla BV puo' riempire la lacuna caricandolo negativamente via lacuna, orbitante attorno a  $B^-$ , e' generata in BV).

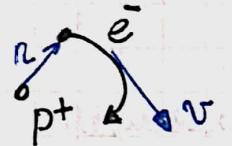
$$B^- + h^+$$

- La lacuna si libera e diventa un portatore mobile lasciando una carica fissa negativa  $B^-$



la probabilità di trarsi nella situazione 1 o nella 2 dipende dalla temperatura ad esempio

Studiamo l'energia di legame.



dal punto di vista classico

$$\frac{mv^2}{R} = \frac{1}{4\pi\varepsilon} \frac{q^2}{R^2}$$

atomo idrogenoide

$$\varepsilon = \varepsilon_0 \varepsilon_r$$

principio di indeterminazione  $\Delta p \Delta x \approx \hbar$

usiamo tale principio

$$L = mv \cdot R = \hbar \quad \rightarrow \text{STATO A MINIMA ENERGIA}$$

$$( \quad \quad \quad \quad )$$

MOMENTO

ANGOLARE

$$\text{sappiamo inoltre che } L^2 = \hbar^2 / (et)$$

combinando queste due informazioni (fisica classica + quantistica)  $\rightarrow$  SERICLASSICA:

$$\frac{\hbar^2}{mR^3} = \frac{1}{4\pi\varepsilon} \cdot \frac{q^2}{R^2}$$

RAGGIO DI BOHR

$$a_0$$

(es. 2,4 nm)

$$R = \frac{4\pi\varepsilon \hbar^2}{m q^2}$$

$$R = \left( \frac{4\pi\varepsilon_0 \hbar^2}{m_0 q^2} \right) \left( \frac{\varepsilon_r}{\mu^*} \right)$$

DISTANZA MEDIA ELETTRONE-IONE

Dunque

$$\begin{aligned} E_D - E_C &= \frac{1}{2} uv^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon} \frac{q^2}{B} \\ &= \frac{1}{2} \left( \frac{1}{4\pi\epsilon} \frac{q^2}{R} \right) - \left( \frac{1}{4\pi\epsilon} \cdot \frac{q^2}{B} \right) \\ &= - \frac{1}{8\pi\epsilon} \cdot \frac{q^2}{R} \\ &= - \frac{q^2}{4\pi\epsilon} \cdot \frac{u q^2}{4\pi\epsilon R^2} \\ &= - \frac{q^4 \mu_0}{2(4\pi\epsilon_0 h)^2} \cdot \frac{\mu^*/\mu_0}{E_R^2} = - R_H \frac{\mu^*/\mu_0}{E_R^2} \end{aligned}$$

costante universale

$R_H$

COSTANTE DI RYDBERG

CAURO DA COMPIERE PER  
STRAPPARE L'ELETTRONE DALL'ATOMO  
di IDROGENO

13,7 eV

$$E_D - E_C = - R_H \frac{\mu^*/\mu_0}{E_R^2}$$

ENERGIA DI LEGAME

da cui  $E_C - E_D = 25,8 \text{ meV}$  (energia di legame dell'atomo docore)

molto vicina al KT a Tambiente (25 meV)

pertanto a  $T \approx 300 \text{ K}$  gli elettroni si liberano dagli atomi di pertanza.

Cio' che si prospetta nel solido e':

una concentrazione intrinseca e docori

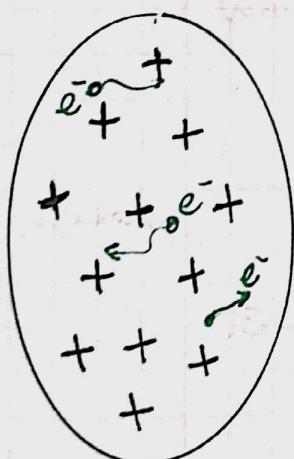
$$n_i = 10^{10} \text{ cm}^{-3}$$

$$N_D = 10^{15-16} \text{ cm}^{-3}$$

Pertanto per ogni impurita' (atomo docore), si liberano altrimenti i nuclei positivi e elettroni liberi.

Questi portatori sono maggioritari e in quantita' molto maggiore rispetto alla concentrazione intrinseca.

Il conduttore e' comunque complessivamente NEUTRO!



Operativamente ad esempio:

$$n = N_D = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$$

MAGGIORITARI

$$p = \frac{n_i^2}{n} = \frac{n_i^2}{N_D} = 10^2 \text{ cm}^{-3} \quad \text{MINORITARI}$$

primo a usare la APPROX. DI MAXWELL-BOLTZMANN

$$n = N_C e^{-\frac{E_C - E_F}{kT}}$$

valida se  $E_C - E_F \gg kT$

$$kT \ln\left(\frac{p_C}{N_D}\right) - E_C + E_F = 0$$

$$\Rightarrow E_F = E_C - kT \ln\left(\frac{p_C}{N_D}\right) \approx E_C - 80 \text{ meV}$$

Sotto  $10^{18} = p_D$  di drogante

va bene usare Maxwell-Boltzmann

(approx.)

$E_F$  sufficientemente  
più basso  
(almeno 3 volte  $kT$ )

Analogamente coi atomi accettori:

$$N_A = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$$

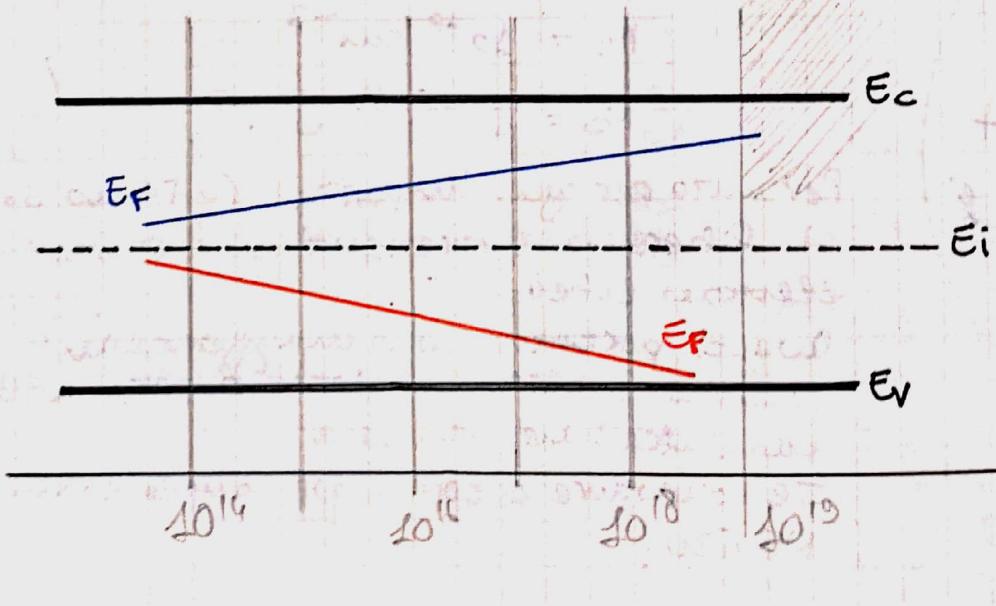
$$p = N_A$$

$$n = \frac{n_i^2}{N_A} = 10^{-3} \text{ cm}^{-3}$$

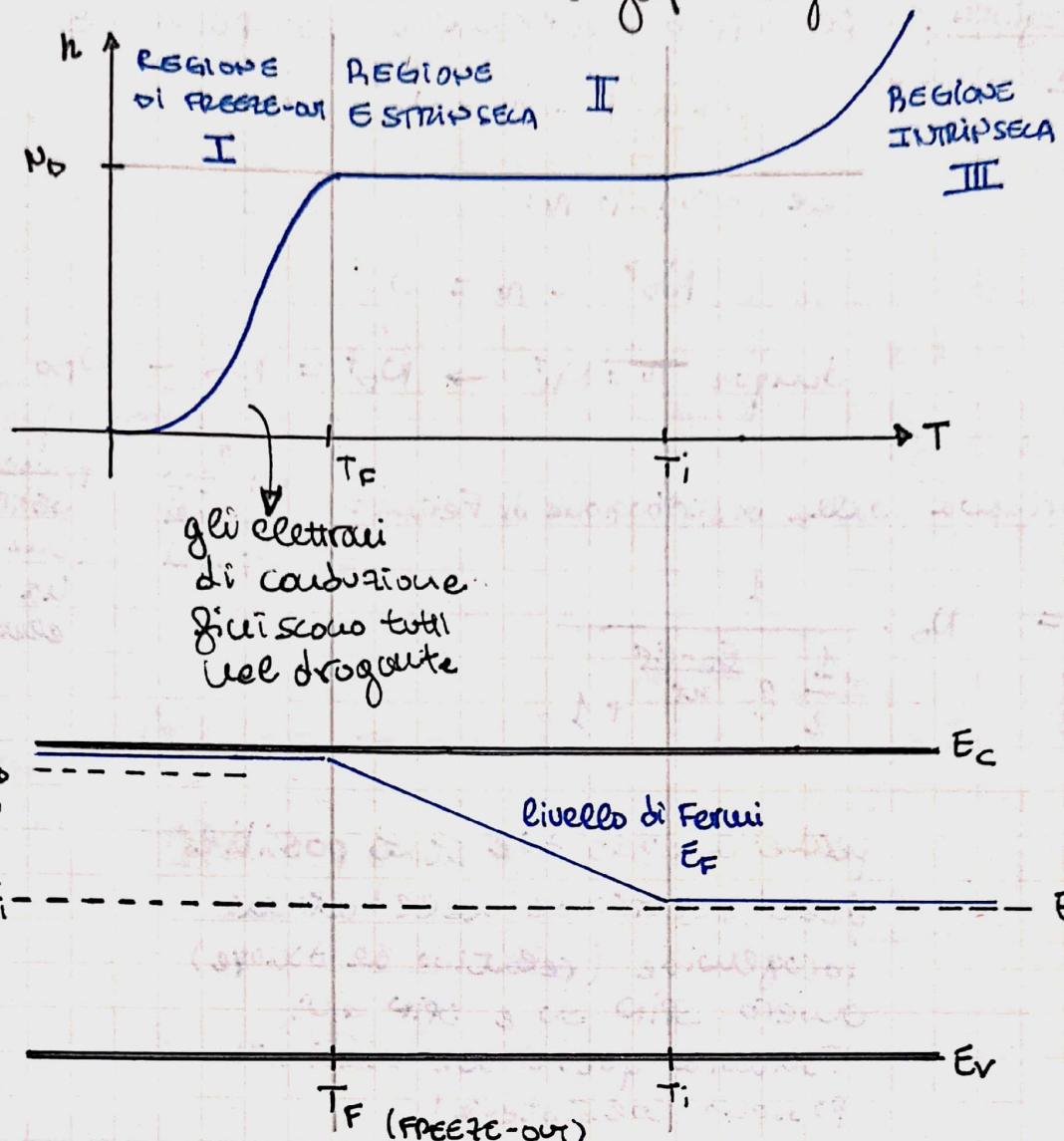
$$p = N_V e^{-\frac{E_V - E_F}{kT}}$$

$$E_F = E_V + kT \ln \frac{N_V}{N_A}$$

$$= E_V + 160 \text{ meV}$$

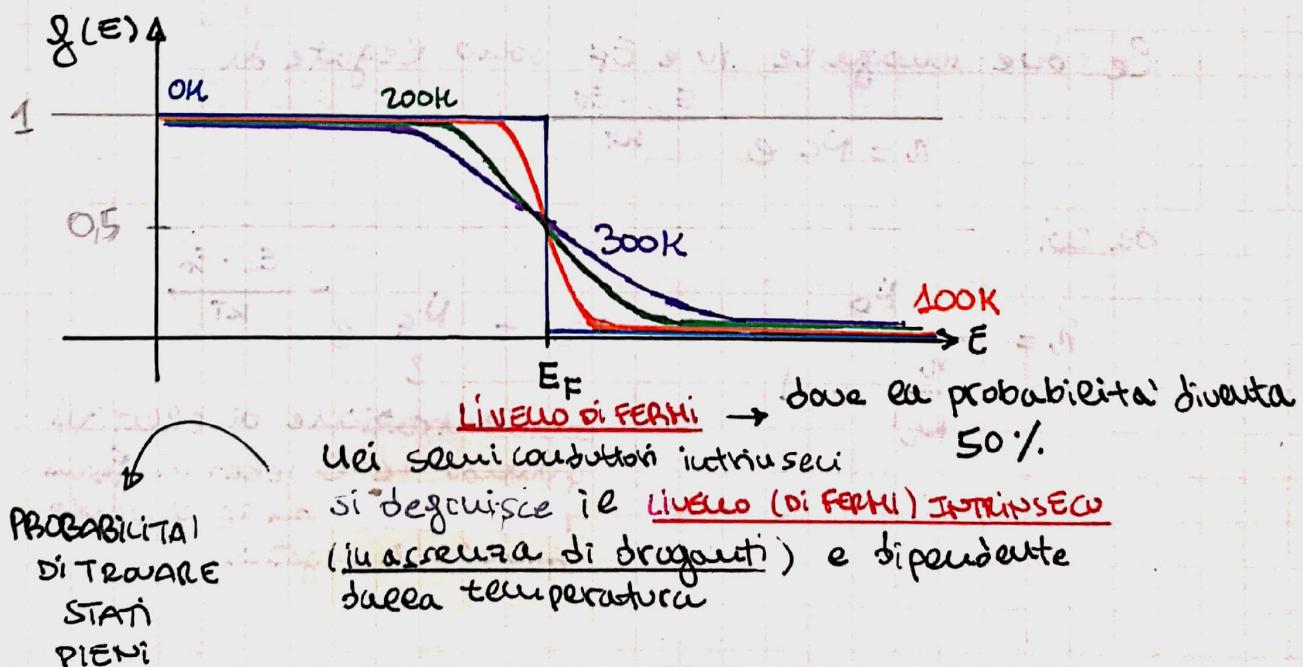


a basse temperature si parla di FREEZE OUT, ovvero c'è una riesce a scavalcare il gap energetico



### NOTE SU LIVELLO DI FERMI E LIVELLO INTRINSECO

la probabilità con cui si riempiono gli stati elettronici si descrive dalla STATISTICA DI FERMI-DIRAC



Cerchiamo di ricavare ora un modello matematico

→ Modello regioi: principio di neutralità complessiva

I - II

$$p + N_D^+ - n - N_A^- = 0$$

se drogato n:

$$N_D^+ - n = 0$$

$$\text{dunque } n = N_D^+ \rightarrow \boxed{N_D^+ = N_D - N_{D0}}$$

$N_{D0}$  si ricava dalla distribuzione di Fermi:

NUERO  
DONORI  
TOTALI

DONORI  
NEUTRI  
(che non  
ha carica  
elettrica)

$$N_{D0} = N_D \cdot \frac{1}{\frac{1}{2} e^{\frac{E_D - E_F}{kT}} + 1}$$

perche' ci sono due stati possibili  
dei elettronc nel atomo  
idrogenoide (relativo al donore)  
ovvero SPIN SU e SPIN GIU.

DONORI  
NON  
IONIZZATI

Tuttavia questi due stati non  
possono coesistere!

Si ottiene

$$N_D^+ = \frac{N_D}{2 e^{\frac{E_D - E_F}{kT}} + 1} = n$$

Le due ineguite n e  $E_F$  sono legate da

$$n = N_C e^{-\frac{E_C - E_F}{kT}}$$

da cui

$$n = \frac{N_D}{\frac{n}{N_C} + 1} \quad \text{con } N_C' = \frac{N_C}{2} e^{-\frac{E_C - E_D}{kT}}$$

concentrazione di elettroni  
quando il livello di Fermi  
coincidesse con il livello  
donore (mergetivo)

in fine

$$n^2 + N_C' n - N_C' N_D = 0 \quad \leftarrow \text{eq. di neutralità con sostituzione}$$

$$n = -\frac{N_C'}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{N_C'}{2}\right)^2 + N_C' N_D}$$

$$n = \frac{N_C'}{2} \left( \sqrt{\left(1 + \frac{4N_D}{N_C'}\right)} - 1 \right) \quad \begin{array}{l} \text{se } N_C' \gg N_D \text{ (alta T)} \\ n \approx N_D \end{array}$$

CONCENTRAZIONE ELETTRICA in REGIONE I-II se  $N_C' \ll N_D$  (bassa T)

trasducendo questi risultati in livello di FERMI:

$$n \approx \sqrt{N_C' N_D}$$

$$n = N_C e^{-\frac{E_C - E_F}{kT}} \Rightarrow E_F = E_C + kT \ln \frac{n}{N_C}$$

$$\textcircled{I} \quad E_F = E_C + kT \ln \left( \sqrt{\frac{N_D}{2N_C}} e^{-\frac{E_C - E_D}{kT}} \right) = E_C + \frac{kT}{2} \ln \frac{N_D}{2N_C} - \frac{E_C - E_D}{2}$$

$$\textcircled{II} \quad E_F = E_C + kT \ln \left( \frac{N_D}{N_C} \right)$$

LIVELLO DI FERMI

in  
REGIONE ESTRINSECA

$$E_F = \frac{E_C + E_D}{2} + \frac{kT}{2} \ln \frac{N_D}{N_C}$$

LIVELLO DI FERMI IN  
REGIONE DI FREEZE-OUT

Analogamente:

$$P = \frac{N_V'}{2} \left( \sqrt{1 + \frac{4N_A}{N_V'}} - 1 \right)$$

$$\text{con } N_V' = \frac{N_V}{4} e^{\frac{E_V - E_A}{kT}}$$

CONCENTRAZIONE DI  
LACUNE in REGIONE

I-II

→ Modello regioni II-III:

( $T \gg T_F$ )

osserviamo ancora la neutralità

$$p + N_D - n - N_A = 0$$

$p, n$  regate dalla legge di azione di massa.

$$n - (N_D - N_A) - \frac{n_i^2}{n} = 0$$

$$\Rightarrow n = \frac{N_D - N_A}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{N_D - N_A}{2}\right)^2 + n_i^2}$$

} drogaggio sia  
tipi n che  
tipi p

sappiamo che

$$n_i = \sqrt{N_C P_V} e^{-\frac{E_L - E_V}{kT}}$$

(CONCENTRAZIONE IUTRUSCA)

- BASSET ( $n_i \ll \frac{N_D - N_A}{2}$ )

$$n = N_D - N_A \quad p = \frac{n_i^2}{N_D - N_A}$$

- ALTE T ( $n_i \gg \frac{N_D - N_A}{2}$ )

$$n = n_i = p$$

CONCENTRAZIONI per regioni II-III

a temperature alte e basse  
( $\gg T_F$ ) per  $N_D > N_A$

se  $N_A > N_D$  si ottiene invece:

- BASSET:  $p = N_A - N_D \quad n = \frac{n_i^2}{N_A - N_D}$

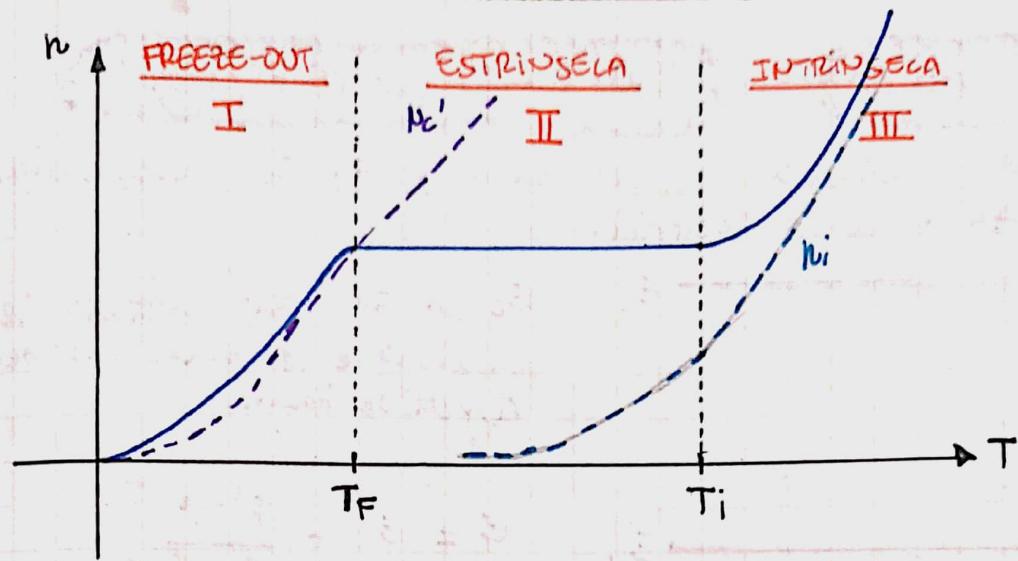
CONCENTRAZIONI per  
REGIONI II-III per  
 $N_A > N_D$

- ALTE T:  $p = n_i = n$

\* DOTÀ: temperatura di freeze-out e iutrusca dipendono da concentrazione drogante.

$T_i$  : TEMPERATURA IUTRUSCA → quando  $n_i = \frac{N_{D,A}}{2}$

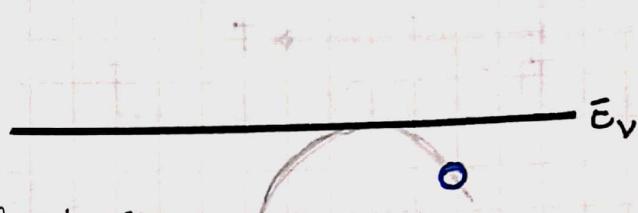
$T_F$  : TEMPERATURA di FREEZE-OUT → quando  $N_C' = N_D$  opp.  $N_V' = N_A$



**TRA SPORTO DI CARICA** → **TRASPORTO per SHIFT/DERIVA**

Come mettiamo in relazione la presenza di  $E_V$ ,  $E_C$  dalle cariche e dalla presenza di campi elettrici.

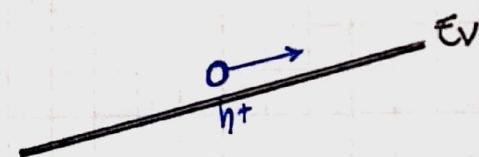
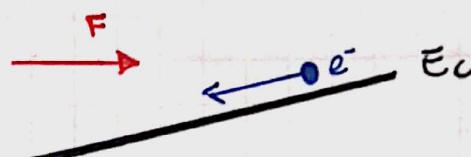
$E_C$   $E_C$  ed  $E_V$  sono soltato ie minimo e ie massimo delle rispettive bande.



Vale inoltre

$$E_C = -qV \quad \begin{matrix} \text{potenziale} \\ \text{elettrostatico} \end{matrix}$$

$$F = -\frac{dV}{dx} = \frac{1}{q} \cdot \frac{dE_C}{dx}$$



$$E = E_C + \frac{\frac{q^2 k^2}{2m_e}}{2U_h^*}$$

energia cinetica

$$E = E_V - \frac{\frac{q^2 k^2}{2m_e}}{2U_h^*}$$

- energia potenziale - energia cinetica

inoltre

$$\frac{dF}{dx} = \frac{\rho}{\epsilon} = \frac{1}{q} \cdot \frac{d^2 E_C}{dx^2}$$

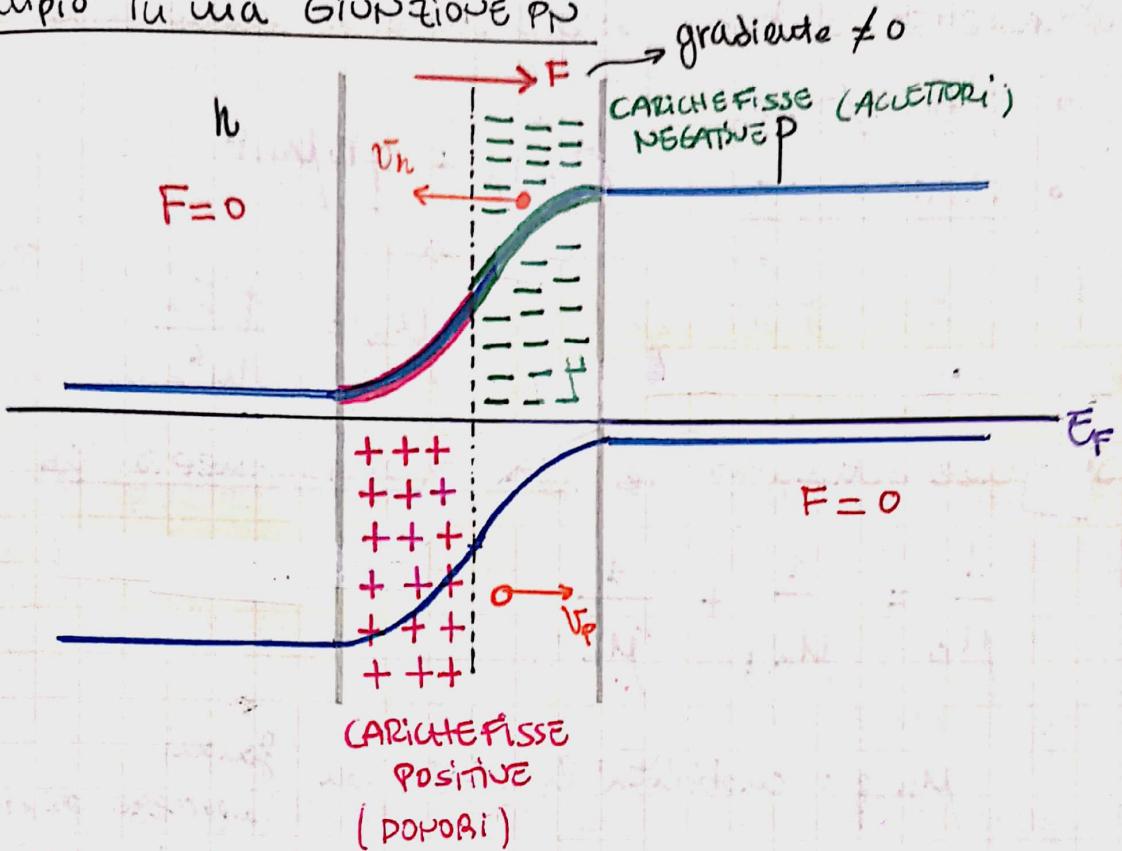
$$\rho = \frac{\epsilon}{q} \cdot \frac{d^2 E_C}{dx^2}$$

Pertanto QUANDO OSSERVO IL DIAGRAMMA A BANDE abbiamo informazioni su

- ) CAMPO ELETTRICO (DERIVATA PRIMA)
- ) DENSITÀ DI CARICA (DERIVATA SECONDA)

curvatura (concavità)  
energia

Ad esempio in una giunzione PN



W: fenomeno di DRIFT (PERMUTA) dovuto alla presenza  
locale di  $F$

CORRENTE DI DRIFT

$$\begin{aligned} j &= q n v_n + q p v_p \\ &= q (\mu_n \cdot n + \mu_p p) F \end{aligned}$$

$$\text{con } \mu_n = \frac{q \tau_n}{m_n^*}$$

	$\mu_n$	$\mu_p$	$\left[ \frac{\text{cm}^2}{\text{V} \cdot \text{s}} \right]$
Ge	3800	1900	
Si	1300	460	
GaAs	8000	320	

Tu dipende da SCATTERING:

( $T = 300 \text{ K}$ )

1) doponi

2) IMPUREZZE IONIZZATE ( $N_D^+, N_A^-$ )

e dunque cambia la mobilità. Per comporre questi effetti

$$\frac{1}{\mu_n} = \frac{1}{\mu_{n,g}} + \frac{1}{\mu_{n,i}}$$

con

$\mu_{n,g}$ : mobilità fondamentale

$\mu_{n,i}$ : mobilità impurezze ionizzate

LEGGE DI MATHIESSEN

COMPOSIZIONE EFFETTI IMPURITÀ

$$\frac{1}{\tau_n} = \frac{1}{\tau_{n,g}} + \frac{1}{\tau_{n,i}}$$

Dunque il trasporto si basa su due processi fondamentali:

- o DERIVA / DRIFT
- o DIFFUSIONE

$$\rightarrow j_n = q n \mu_n F$$

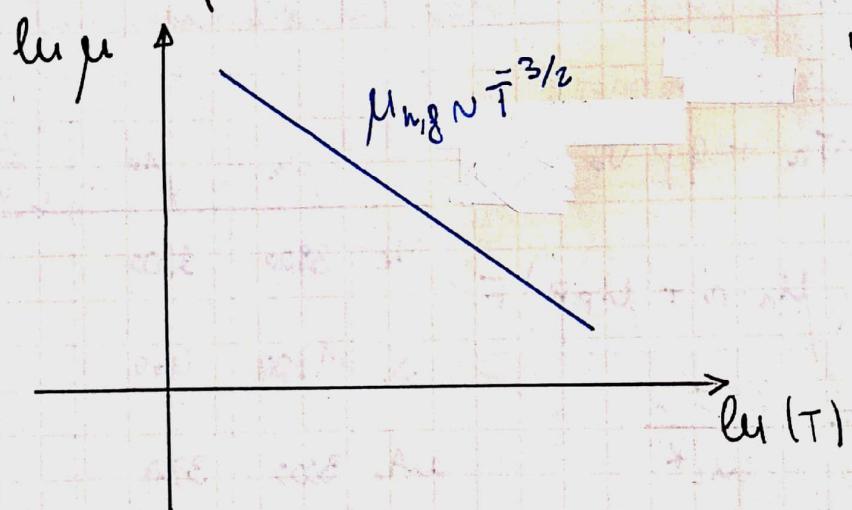
con

$$\mu_n = \frac{q T_n}{m^*_c}$$

Osserviamo un dettaglio, i.e. TEMPO DI RILASSAMENTO  $\tau_{nr}$

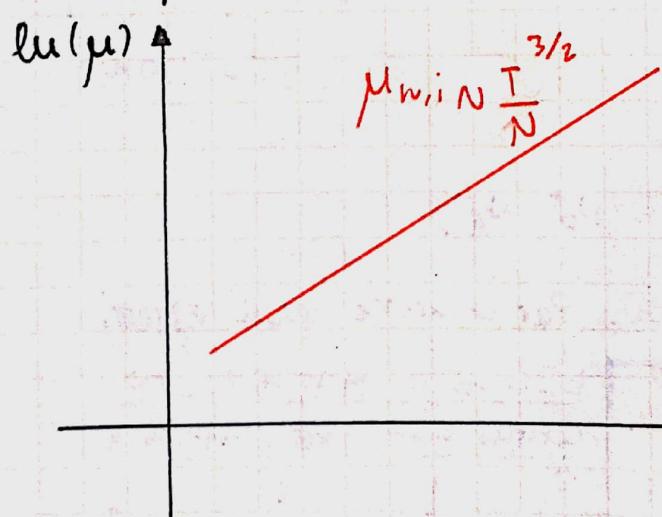
$$\frac{1}{\mu_n} = \frac{1}{\mu_{n,g}} + \frac{1}{\mu_{n,i}}$$

$\mu_{n,i}$ : mobilità limitata da forze impurezze ionizzate  
dipende da temperatura e concentrazione di dopanti.



mobilità peggiora  
perché  
se  $T \uparrow$  aumenta  
la concentrazione di  
forze (vibrazioni)  
e quindi di urti

$$T \uparrow \mu_n \downarrow$$

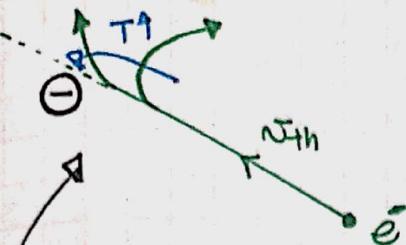


- la dipendenza dalla concentrazione  $N$  di impurezze ionizzate è chiara.

- la proporzionalità dalla temperatura si può studiare analizzando le impurezze ionizzate.

$\downarrow$   
ln(T) sia un atomo accettore  
è  $\ominus$  ionizzato  
in substrato.

ca' di disturbo del moto per  
interazione coulombiana.



se aumenta  $T$  il tempo speso dall'elettrone nei pressi dell'impurezza diminuisce, quindi l'elettrone verrà poco deflesso.

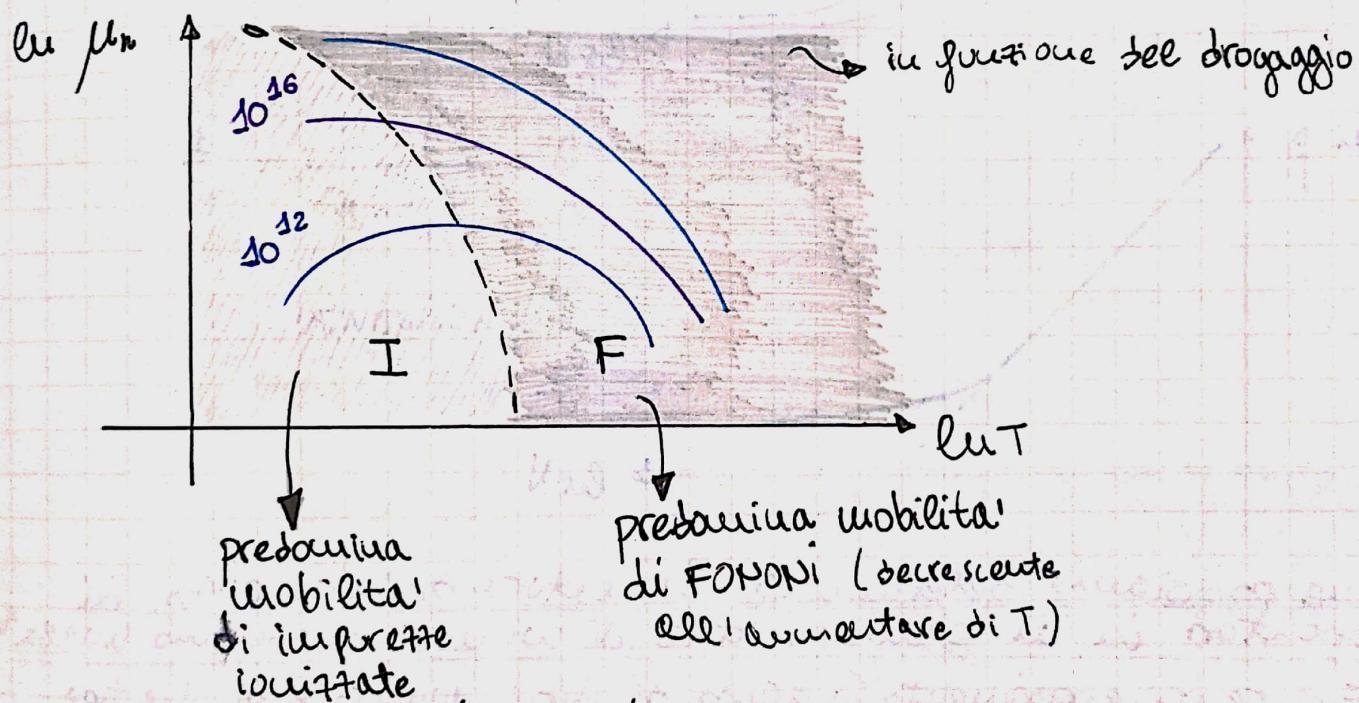
\*POTA: Non si considera la velocità di drift poiché l'elettrone fa moto browniano con cammino libero e tempo di riassestamento dipendenti dalla velocità termica più che dalla velocità di drift.

Questa interazione con un spostamento complessivo medio nella direzione del campo elettrico (velocità di drift)

↳ E' un moto browniano che si sposta

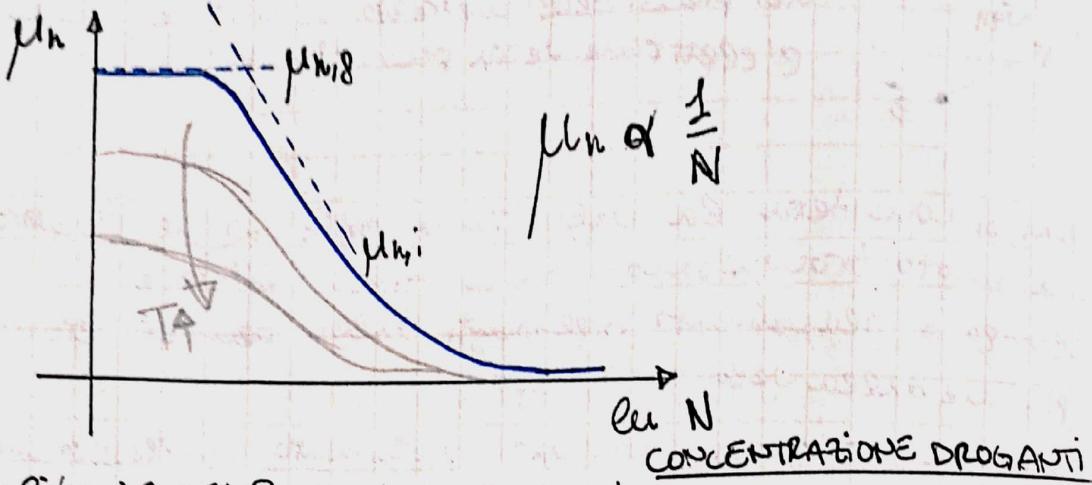
Moto browniano e di drift si sovrappongono

Osserviamo dunque la mobilità in funzione del drogaggio e temperatura:

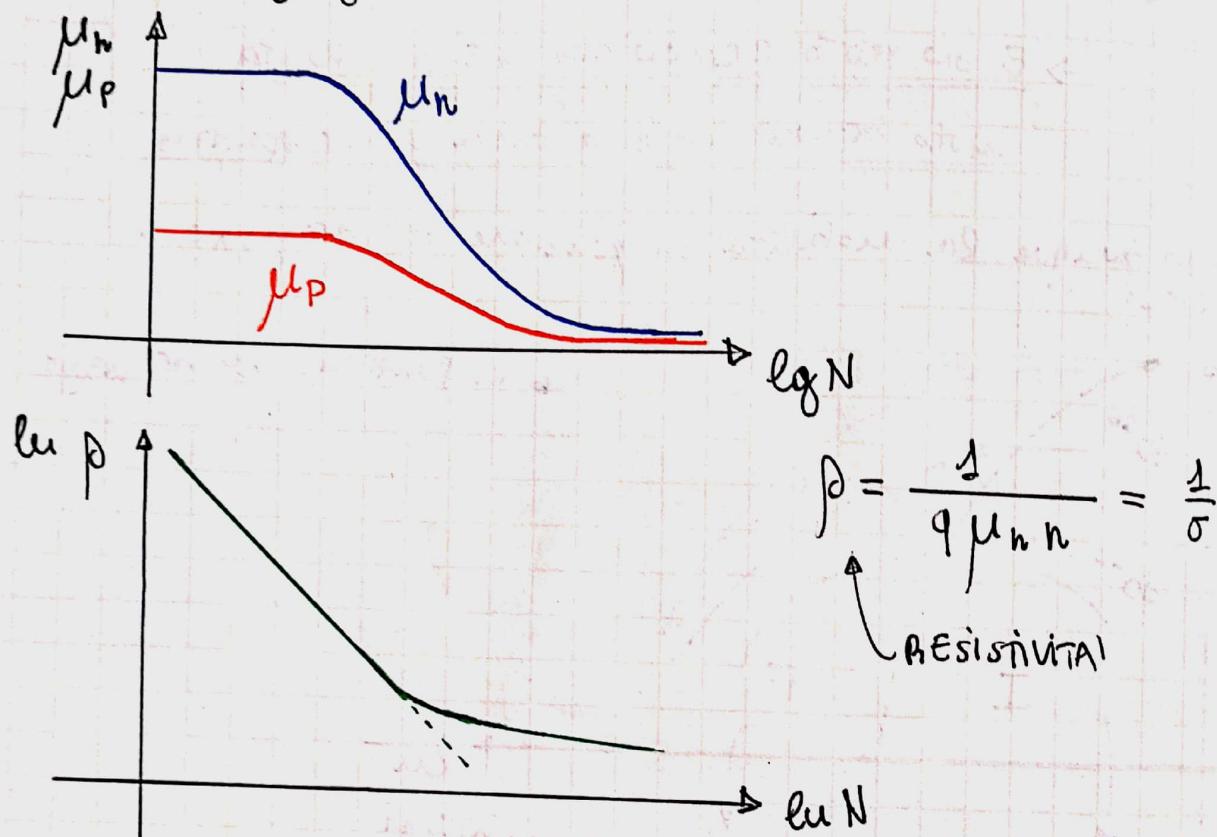


alle basse  $T$ , mobilità fornita  
alta (pochi phononi, poca agitazione  
termica) prevale la MOBILITÀ  
DA IMPUREZZE IONIZZATE, che  
è crescente perciò aumentando  
la temperatura i doni facettati  
si ionizzano più facilmente

Si osserva che



Di solito il grafico che si usa è:



Come possiamo determinare la natura del trasporto di portatori in un semiconduttore di cui non conosciamo nulla?

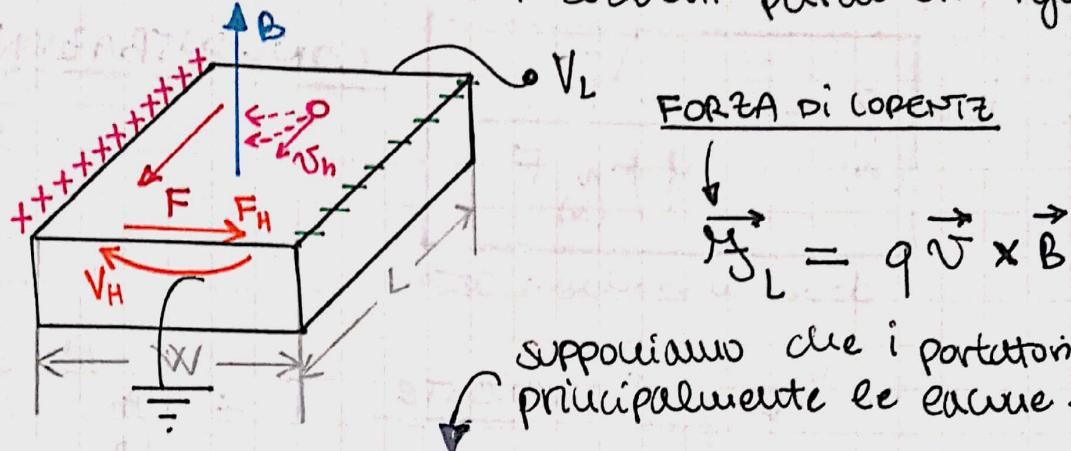
Esiste un esperimento in grado di dire quanti e di che tipo sono i portatori?

e la concentrazione di drogante?

→ ci è l'EFFETTO HAU

# l'EFFETTO HALL

è un esperimento per determinare la natura dei portatori; la quantità di drogante; la mobilità di un semiconduttore con i suddetti parametri iguali.



Per la forza di Lorentz le lacune si separano creando una sorta di dipolo.

Si genera un campo elettrico (e differenza di potenziale) le particelle vengono respinte rispetto al loro cammino di direzione iniziale, fino a raggiungere un equilibrio, con le portatrici che "camminano dritto".

$$q \vec{V}_H \times \vec{B} = q \frac{\vec{V}_H}{W} \quad (\underline{\text{EQUILIBRIO}})$$

$$(M_p) \frac{V_L}{L} B = \frac{V_H}{W}$$

unica incognita!

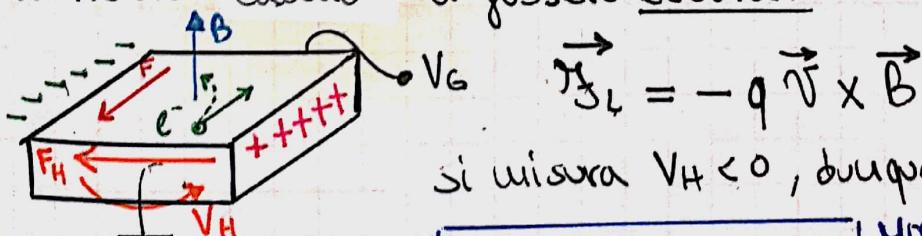
$$M_p = \frac{1}{B} \cdot \frac{V_H}{V_L} \cdot \frac{L}{W}$$

Misurando la  $V_H$ , osservando che è positiva  $V_H > 0$ , riusciamo ad attribuire il trasporto di carica alle LACUNE.

## MOBILITÀ LACUNE

### effetto Hall

Se avessero lacune ci fossero elettroni:



si misura  $V_H < 0$ , dunque i portatori sono elettroni

$$M_n = \frac{1}{B} \cdot \frac{V_H}{V_L} \cdot \frac{L}{W}$$

MOBILITÀ ELETTRONI  
effetto Hall

possiamo misurare la DENSITA' DI CORRENTE; ricaviamo dunque la concentrazione da:

$$\overset{\circ}{j}_p = q \underset{(n)}{P} \underset{(n)}{\mu_p} \underset{(n)}{F}$$

$$\hookrightarrow \underset{(n)}{P} = \frac{\overset{\circ}{j}_{p(n)}}{q \underset{(n)}{\mu_p} \underset{(n)}{F}}$$

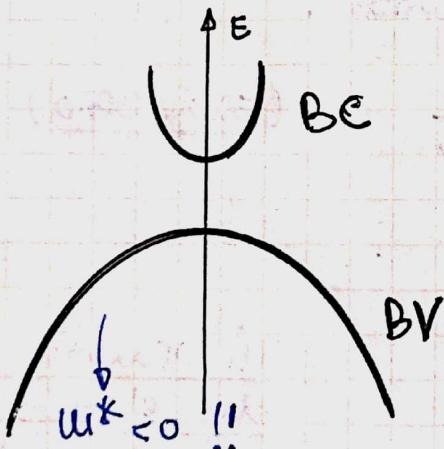
### CONCENTRAZIONI

dove conosciamo tutto

$$\hookrightarrow \text{a T ambiente } \underset{(n)}{P} = N_A \underset{(D)}{F}$$

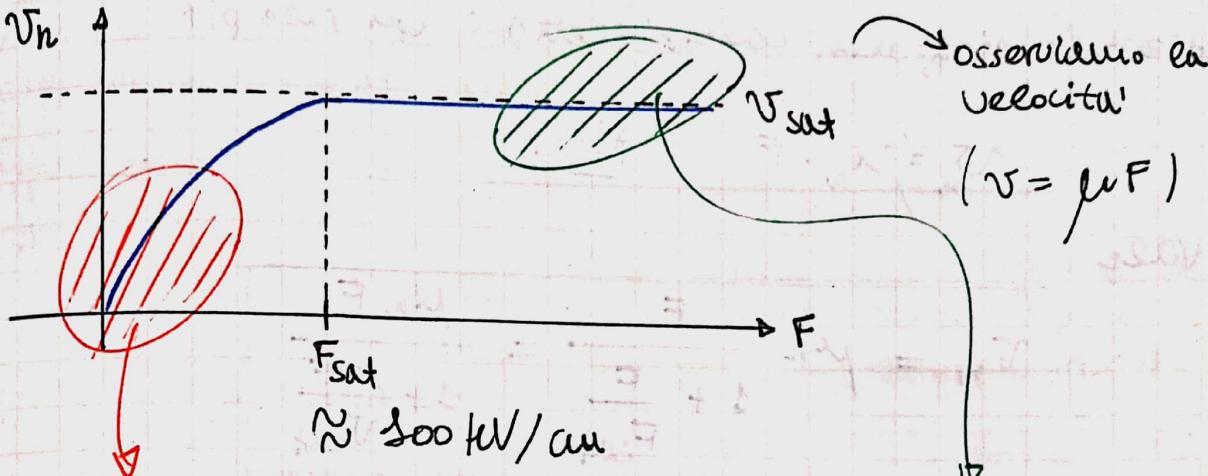
\*NOTA: occorre specificare, ancora una volta, che le lacune NON ESISTONO

↪ sono l'effetto di una BANDA di VALENZA quasi piena, ma pur sempre elettronici



La differenza tra elettroni in BC e BV è la curvatura, e dunque la MASSA EFFICACE che in BV è negativa! ecco spiegato perché la FORZA DI LORENZ HA SEGNO OPPOSTO.

osserviamo ora la DIPENDENZA DELLA MOBILITÀ DAL CAMPO ELETTRICO:

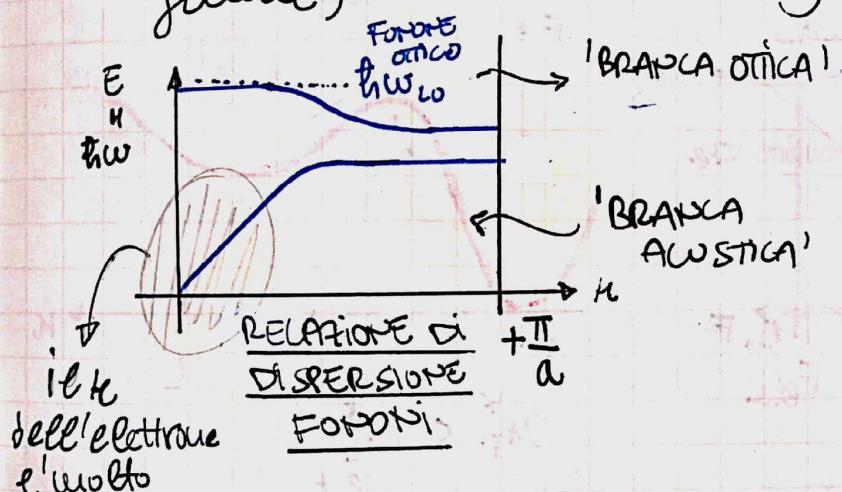


già ora abbiamo parlato di MECANISMI DI SCATTERING

a bassi campi elettrici (con gaudì a bassa energia)

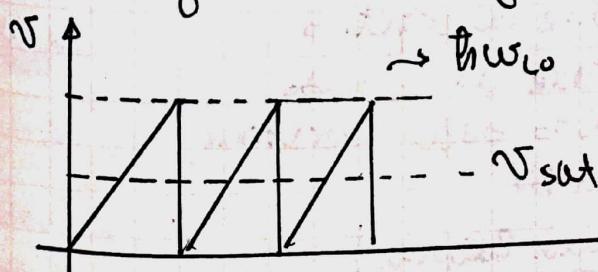
(semplice cambio di direzione  
e momento dell'elettrone,  
che cede poca energia al  
fouone)

ad alti campi elettrici  
(e velocità) gli  
elettroni possono  
interagire con la  
BRAVCA OTICA dei  
fouoni con un'energia  
non indifferente  
perché appunto gli  
elettroni sono più  
energetici con campi  
elettrici intensi.



piccolo rispetto  
al bordo zona  
(a causa dello  
scattering) → pertanto l'elettrone  
interagisce con  
gaudi a bassa  
energia

osservando i modelli di Drude, a volte capita che altro  
che l'elettrone raggiunga un'energia cinetica tale da  
interagire con un fouone ottico.



$$\frac{1}{2} m^* v^2 = \hbar \omega_0$$

$$V = \sqrt{\frac{2 \hbar \omega_0}{m^*}} \quad \begin{matrix} \leftarrow \text{VELOCITÀ} \\ \leftarrow \text{LIMITE} \end{matrix}$$

$$V_{sat} = \sqrt{\frac{\hbar \omega_0}{2 m^*}} \quad \begin{matrix} \leftarrow \text{VELOCITÀ} \\ \leftarrow \text{MEDIA} \end{matrix}$$

cio' e' indipendente dal campo elettrico (vorrebbe dire aumentare la frequenza degli urti lasciando invariata  $v_{sat}$ )  
in condizioni di grandi campi elettrici non vale più

$$v_n = \mu_n \cdot F \quad \underline{\text{NO!}}$$

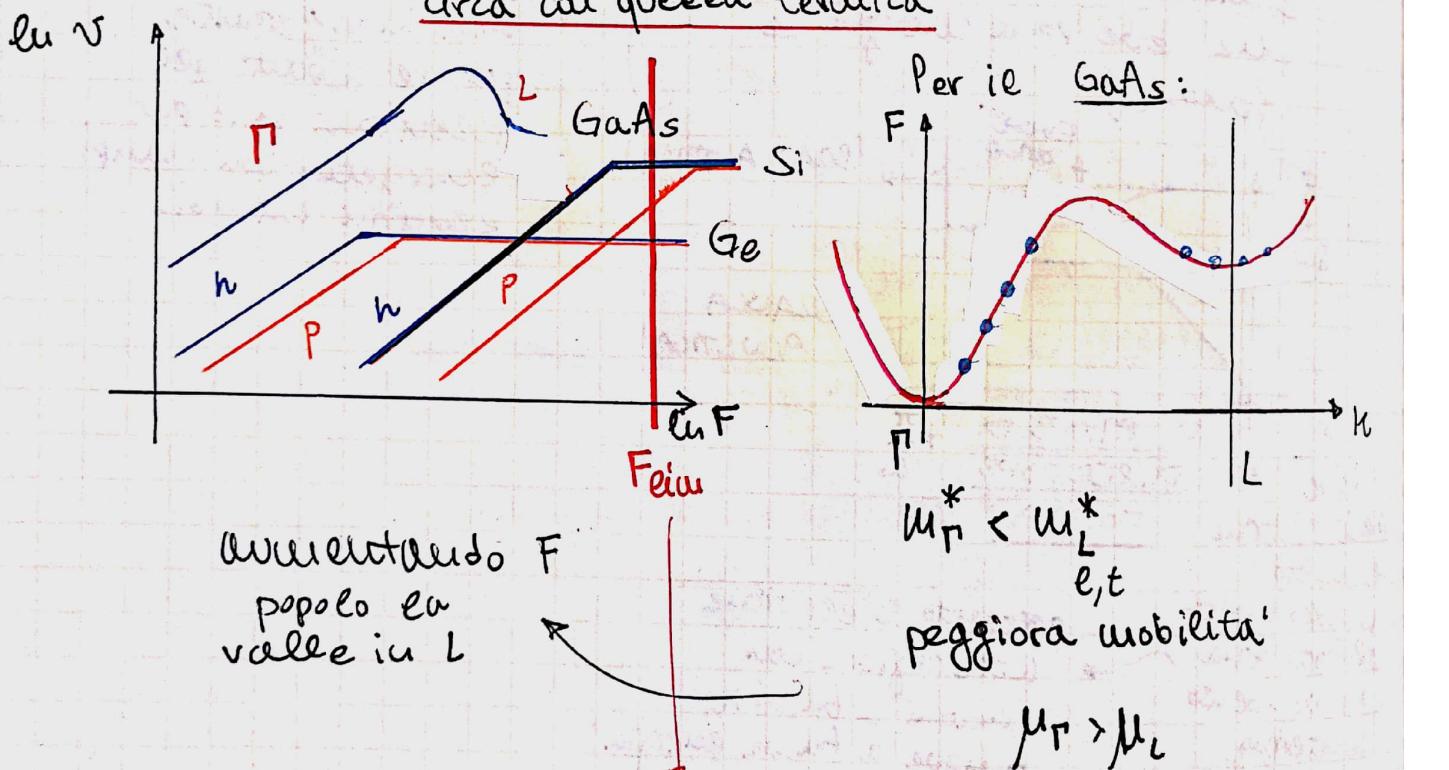
ma vale

$$v_n = \mu_n \frac{F}{1 + \frac{F}{F_{sat}}} = \frac{\mu_n F}{1 + \frac{\mu_n F}{v_{sat}}}$$

FORMULA VELOCITA' EMPIRICA (per elevati campi)

$$v_{sat} \approx \sqrt{\frac{kT}{m^*}} \approx v_{th} (\approx 10^7 \text{ cm/s})$$

la velocita' di saturazione coincide circa con quella termica



aumentando  $F$   
popola la  
valle in  $L$

$\mu_P^* < \mu_L^*$   
 $\text{e.t}$   
peggiora mobilità'

$$\mu_P > \mu_L$$

oltre un certo campo  $F_{\text{critico}}$   
può accadere

### IONIZZAZIONE PER IMPATTO

per cui un elettrone energetico  
in BC può generare un secondo  
elettrone a seguito dell'interazione  
con un elettrone in BV.

l'elettrone in BC  
è molto energetico  
anche più dei

GAP. Cede la  
sua energia a un  
elettrone in BV

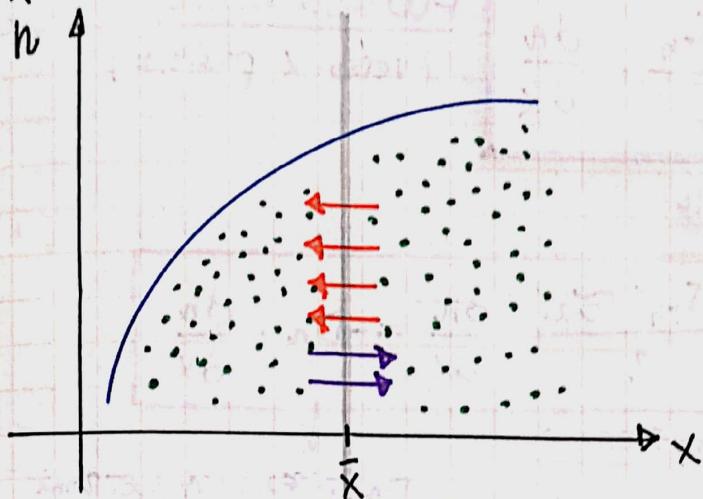
facendogli superare

il GAP  $\rightarrow$  genera anche una lacuna!

# il PROCESSO DI DIFFUSIONE

è un meccanismo che vede trasporto di portatori NON per la presenza di un campo elettrico.

Supponiamo ci sia un GRADIENTE DI CONCENTRAZIONE



ci sono elettroni in moto browniano, con

- CAMMINO LIBERO  $\lambda$
- TEMPO MEDIO DI SCATTERING  $\tau_m$

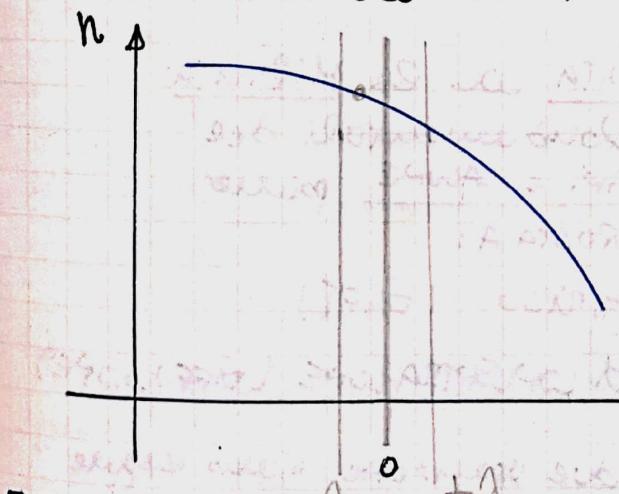
gli elettroni si muovono dunque in direzione totalmente casuale, in assenza di campi.

Se ci posizioniamo in  $\bar{x}$  delimitiamo due regioni, con concentrazione elettronica differente.

Se dunque misuriamo i flussi di elettroni in  $\bar{x}$ , sebbene tutti gli elettroni si muovono in modo casuale o verso dx o verso sx, il flusso  $dx \rightarrow sx$  sarà comunque maggiore del flusso  $sx \rightarrow dx$ , semplicemente perché a dx ci sono più elettroni

→ MECANISMO alla base della DIFFUSIONE

dato al GRADIENTE di CONCENTRAZIONE



dunque calcoliamo i flussi in questo ipotetico semiconduttore uno-dimensionale

$$\phi_{\rightarrow} = \frac{1}{2} n(-\frac{\lambda}{2}) V_{th}$$

$$\phi_{\leftarrow} = \frac{1}{2} n(+\frac{\lambda}{2}) V_{th}$$

(fattore  $1/2$  perche' metà verso dx e metà verso sx)

$$\phi_{\text{NETTO VERSO } dx} = \phi_{\rightarrow} - \phi_{\leftarrow} = - \frac{V_{th}}{2} \left( n(+\frac{\lambda}{2}) - n(-\frac{\lambda}{2}) \right)$$

sviluppando con Taylor:

$$\phi = \frac{V_{th}}{2} \left( n(0) + \frac{dn}{dx} \cdot \frac{\lambda}{2} - n(0) + \frac{dn}{dx} \cdot \frac{\lambda}{2} \right)$$

$$\rightarrow \phi = - \frac{\lambda V_{th}}{2} \cdot \frac{dn}{dx}$$

FLUSSO NETTO  
(verso x positivo)

### I LEGGE DI FICK

$$\phi = - \frac{V_{th}^2 T_{th}}{2} \cdot \frac{dn}{dx} = -D_n \cdot \frac{dn}{dx}$$

DIFFUSIONE DI ELETTRONI

$D_n$  DIFFUSIONE ELETTRONI

Sviluppiamo  $D_n$ :

$$D_n = \frac{V_{th}^2 T_{th}}{2} \cdot \frac{w^*}{w^*} \cdot \frac{q}{q} = \frac{kT}{q} \mu_n$$

energia cinetica  
elettrone a T ambiente

$\rightarrow kT$

TEPSIOTERMICA  $V_{th}$

$$\rightarrow D_n = \frac{kT}{q} \mu_n$$

LEGGE DI EINSTEIN

Lega la DIFFUSIONE con la MOBILITÀ  
i due parametri fondamentali del  
TRASPORTO DI ELETTRONI e LACUNE poiché  
descrivono la RISPOSTA A:

- CAMPO ELETTRICO (DRIFT)

- GRADIENTE DI CONCENTRAZIONE (diffusione)

è intuitivo che le due grandezze siano legate

$$D_n = \left[ \frac{cm^2}{s} \right] \quad V_{th} = [V] \quad \mu_n = \left[ \frac{cm^2}{V \cdot s} \right]$$

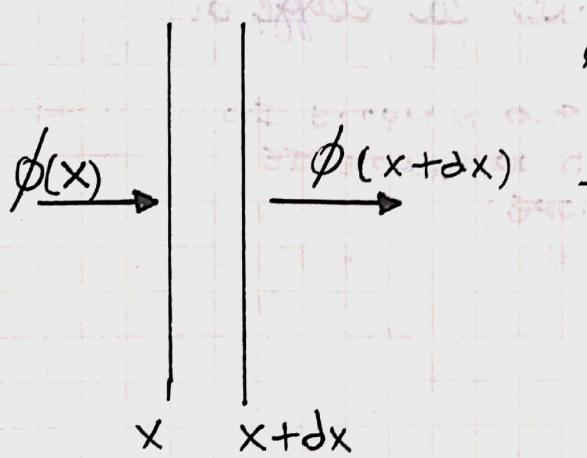
Ricapitoliamo dunque quanto detto sull'diffusione:

- I LEGGE DI FICK:

$$\left. \begin{aligned} \phi_n &= -D_n \frac{dn}{dx} \\ \phi_p &= -D_p \frac{dp}{dx} \end{aligned} \right\} \text{sempre opposto al gradiente}$$

- II LEGGE DI FICK:

Supponiamo una sezione spaziale con un flusso elettrico entrante e uno uscente:



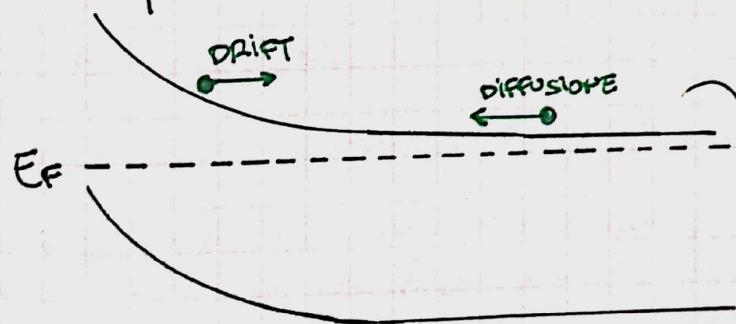
$$\phi_n(x) = \phi_n(x+dx) + \frac{dn}{dt} dx$$

$$-\frac{D_n}{dx} \frac{dn}{dx} = -D_n \frac{\partial n}{\partial x} - D_n \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} + \frac{\partial n}{\partial t} dx$$

$$\rightarrow \boxed{\frac{\partial n}{\partial t} = D_n \frac{\partial^2 n}{\partial x^2}} \quad \underline{\text{II LEGGE di FICK}}$$

- $J_n = q n \mu_n F + q \underbrace{D_n \frac{\partial n}{\partial x}}_{\text{DIFFUSIONE}} = 0$   $\uparrow$  all'equilibrio

all'equilibrio:



i due contributi di corrente si equilibrano

qui ci sono più elettroni perché i livelli di Fermi si trovano alla banda di conduzione

diffusione verso sx

$$n = N_C e^{-\frac{E_C - E_F}{kT}}$$

$$F = \frac{1}{q} \cdot \frac{dE_C}{dx} = \frac{1}{q} \cdot \frac{d}{dx} \left( E_F - kT \ln \frac{n}{N_C} \right) = -\frac{kT}{q} \cdot \frac{1}{n} \cdot \frac{dn}{dx}$$

Sostituendo in  $J_n$ :

$$J_n = -q n \mu_n \frac{kT}{q} \cdot \frac{1}{n} \cdot \frac{dn}{dx} + q D_n \frac{dn}{dx} = 0$$

da cui:

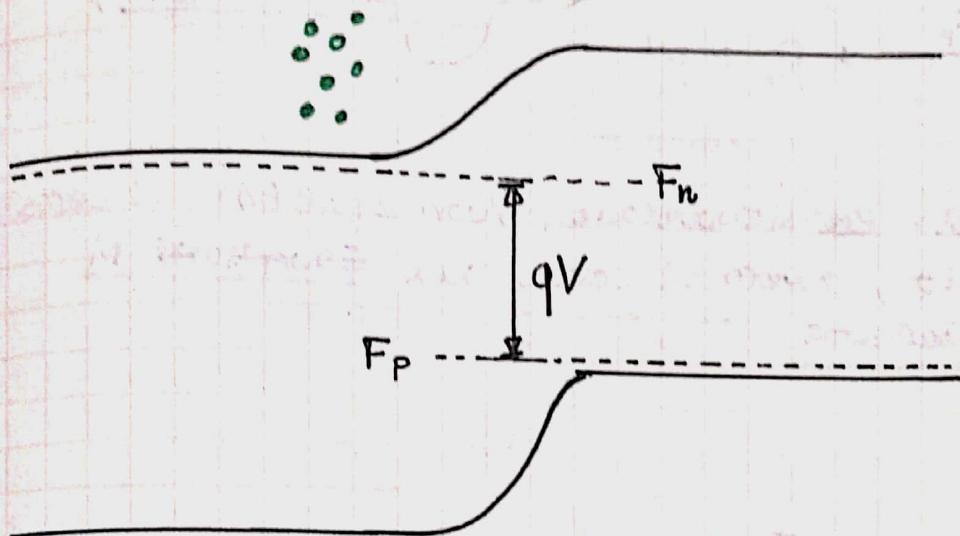
$$D_n = \mu_n \frac{kT}{q}$$

Formula di Einstein

abbiamo ritrovato la legge di Einstein!

(quando un profilo si muove in conseguenza ad un gradiente di concentrazione)

Supponiamo una giunzione PN:



Vi e' una iniezione di elettroni MINORITARI dalla regione n alla regione p, in ECESSO

rispetto a  
quegli che  
ci sarebbero  
all'equilibrio

n' p'

per cui sono in una regione  
driogata p

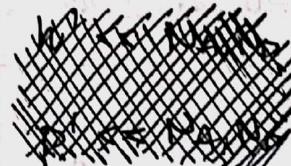
Dunque:

$$n = n_0 + n'$$

FUORI EQUILIBRIO

↓  
Equilibrio IN ECESSO

$$p = p_0 + p'$$



Ora

$$n' \ll N_A, N_D$$

$$p' \ll N_A, N_D$$

Si parla di DEBOLE INIEZIONE

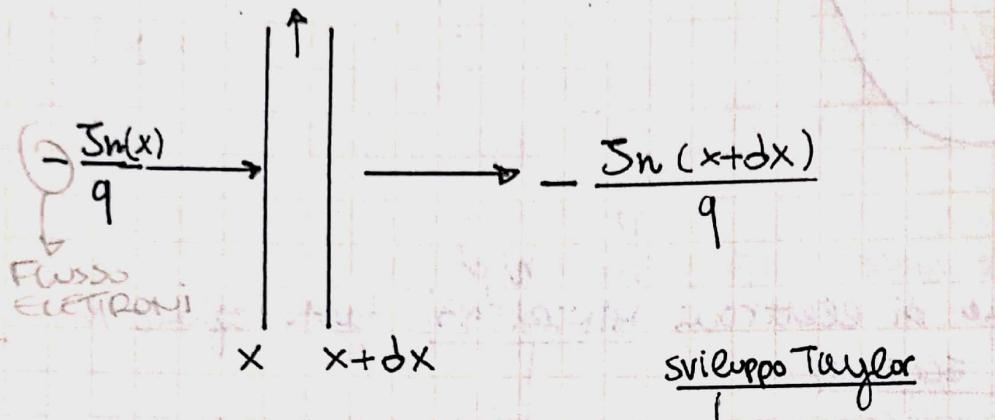
Fuori equilibrio il livello di FERMI EF perde di significato (per cui descrive la distribuzione dei portatori all'equilibrio)

Faremo comunque valere un concetto simile, ovvero i LIVELLI DI QUASI FERMI  $F_n$ ,  $F_p$ ; opportuni livelli energetici relativi alla distribuzione energetica di elettroni e lacune.

$$n = N_c e^{-\frac{E_C - F_n}{kT}} = n_0 + n' \quad (\text{Fuori Equilibrio})$$

$$p = N_V e^{+\frac{E_V - F_p}{kT}} = p_0 + p' \quad \text{di}$$

Per descrivere meglio la situazione fuori equilibrio, si cerca di fare un **BILANCIO**, ovvero si cerca una EQUAZIONE DI CONTINUITÀ DELLA CORRENTE



$$\frac{\partial n}{\partial x} = -\frac{J_n}{q} - \left( -\frac{J_n}{q} - \frac{1}{q} \frac{\partial J_n}{\partial x} \right) = \frac{1}{q} \cdot \frac{\partial J_n}{\partial x}$$

↓  
FLUSSO USCENTE  
FLUSSO ENTRANTE

potrebbero esserci però anche **FENOMENI DI GENERAZIONE** e di **RICOMBINAZIONE** descritti dai rispettivi TASSI  $g_n$  e  $r_n$

$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q} \cdot \frac{\partial J_n}{\partial x} + g_n - r_n$	<u>EQUAZIONI DI CONTINUITÀ</u>
$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{q} \cdot \frac{\partial J_p}{\partial x} + g_p - r_p$	

per semplificare ci basiamo su tre ipotesi:

I) DEBOLE INIEZIONE  $n_p' \ll N_A \quad p_n' \ll N_D$

II)  $F \approx 0$  CAMPO ELETTRICO TRASCURABILE  
(In una giunzione puoi uscire dalla zona di sottrazione)

III)  $N_A, N_D$  UNIFORMI

Dunque in

$$S_n = q n / \mu n F + q D_n \frac{\partial n}{\partial x}$$

→ trascurabili

possiamo scrivere l'equazione di continuità:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial n}{\partial t} = D_n \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} + g_n - r_n \\ n = n_0 + n' \end{array} \right.$$

$$r_n = \frac{n'}{t_{rec}}$$

lineare

tasso di ricombinazione proporzionale all'eccesso

nel equilibrio non c'è ricombinazione (tradizionale)

NON TERMICA

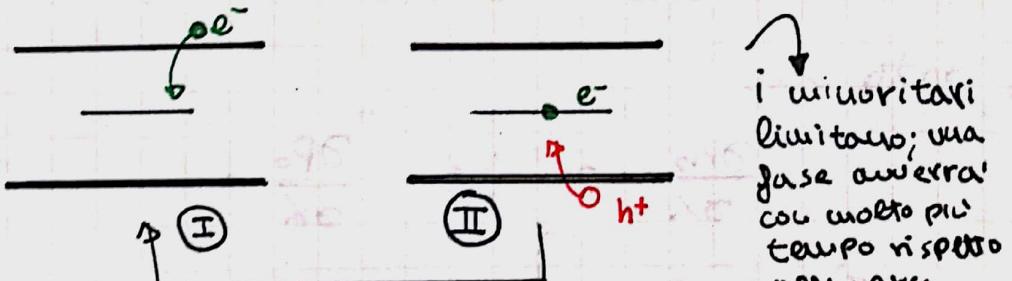
RICOMBINAZIONE DOVUTA A ELETTRONI LATTICI DA DIFETTI IN MID-GAP

(SHOCKLEY-HALL-READ)

\*NOTA: a seconda della polarizzazione i difetti possono fungere da centri di generazione o ricombinazione

\*NOTA: gli elettroni vanno ad occupare dei livelli MID-GAP dovuti a DIFETTI (superficiali o di interfaccia).

Le due fasi avvengono in tempi differenti, a seconda della disponibilità dei portatori



Dunque ora le cariche vengono attirate nel MID-GAP e quando il salto avviene si accade la RICOMBINAZIONE.  
E si ricomincia dall'inizio.

Se  $F_n > F_p \rightarrow$  CENTRO DI RICOMBINAZIONE

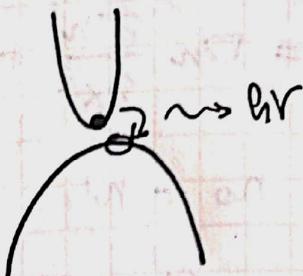
Se  $F_n < F_p \rightarrow$  CENTRO DI GENERAZIONE

Inoltre  $\tau_n$ : TEMPO DI RICOMBINAZIONE DEI MINORITARI

( $\approx \mu s$ )

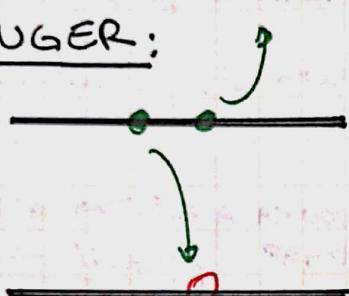
Altri meccanismi di ricombinazione sono:

(\*) BANDA-BANDA: quando un elettrone incontra una lacuna in BV (con possibile emissione di radiazione dell'energia in eccesso)  
Avviene soltanto nei semiconduttori a GAP DIRETTO



nel BANDA-BANDA  
INDIRETTO  
servirebbe  
anche un  
FONONE, difficile  
da trovare

(\*) AUGER:



un elettrone cede la sua energia  
(ricombinandosi con la lacuna)  
ad un terzo elettrone.

Sviluppiamo ora la formula complessiva:

$$\frac{\partial}{\partial t} (n + h') = D_n \frac{\partial^2}{\partial x^2} (n + h') + g_n - \frac{h'}{\tau_n}$$

dato che

$$\frac{\partial n}{\partial x} = 0 \quad \text{e} \quad \frac{\partial p}{\partial x} = 0$$

si ottiene da:

$$\frac{\partial h'}{\partial t} = D_n \cdot \frac{\partial^2 h'}{\partial x^2} + g_n - \frac{h'}{\tau_n}$$

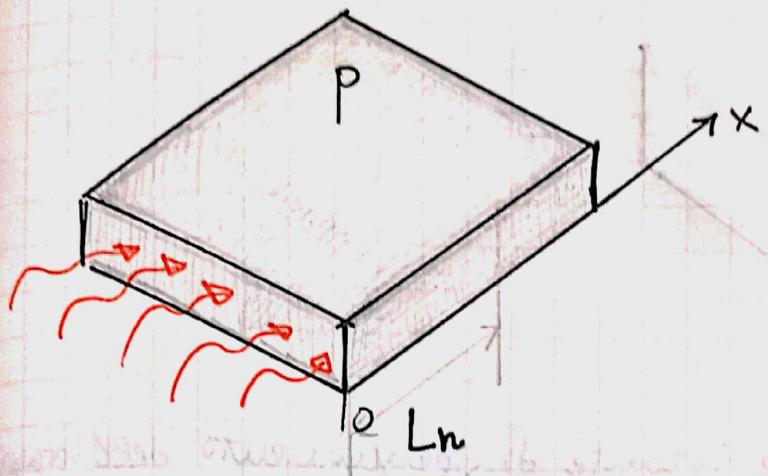
nella regione p

$$\frac{\partial p'}{\partial t} = D_p \frac{\partial^2 p'}{\partial x^2} + g_p - \frac{p'}{\tau_p}$$

nella regione n

EQUAZIONE DEI RITORITARI

## ESEMPIO: GENERAZIONE/RICOMBINAZIONE PER IRRAGGIAMENTO



sottoponiamo i e semiconduttore drogato p ad un irraggiamento

i fotoni liberano/punxano coppie elettron- forza elettrone-creando una concentrazione superficiale di minoritari (ma non nel volume)

$$\rightarrow n(x=0)$$

$$\rightarrow g_n = 0 \quad (\text{NO GENERAZIONE NEL VOLUME, SOLO SUPERFICIALE})$$

$\rightarrow$  STATO STAZIONARIO (fuori equilibrio)

Come andrà  $n(x)$ ?

$$\frac{\partial n'}{\partial t} = D_n \frac{\partial^2 n'}{\partial x^2} + g_n - \frac{n'}{\tau_n}$$

$= 0$

STAZIONARIO

DISTANZA MEDIA PERCORSA DAI MINORITARI PRIMA DI RICOMBINARSI

$$\frac{\partial^2 n'}{\partial x^2} = \frac{n'}{L_n^2}$$

con

$$L_n = \sqrt{D_n \tau_n} \quad (\approx 6 \cdot 10^{-5} \text{ m})$$

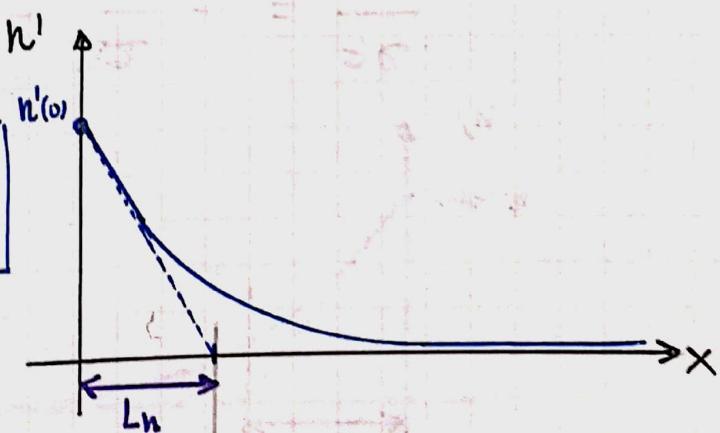
WINGHEZZA DI DIFFUSIONE

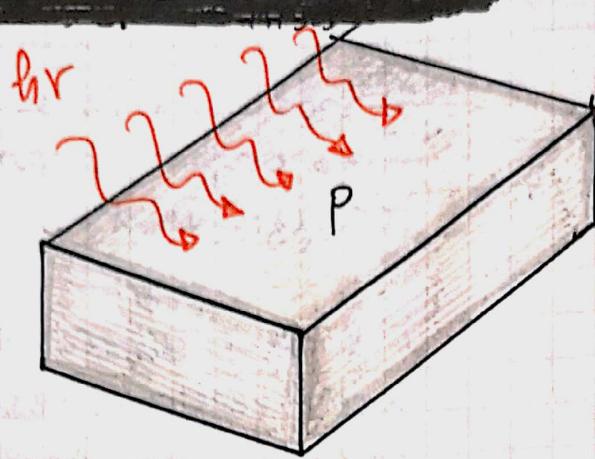
proporzionale a DIFFUSIUTA e TEMPO DI SOPRAVIVENZA PRIMA DELLA RICOMBINAZIONE

$$n'(x) = A e^{\frac{x}{L_n}} + B e^{-\frac{x}{L_n}}$$

NON ACCETTABILE FISICAMENTE

$$n'(x) = n'(0) e^{-x/L_n}$$





$\rightarrow h'(t=0)$  con  $t=0$  istante di spegnimento dell'irraggiamento

- ento

$$\rightarrow t=0 \rightarrow g_h=0$$

$$\rightarrow h'(t) = ?$$

scriviamo l'eq. dei milionari

$$\frac{\partial h'}{\partial t} = D_n \frac{\partial^2 h'}{\partial x^2} + g_h - \frac{h'}{\tau_n}$$

- allo stato stazionario (irraggiamento prolungato)

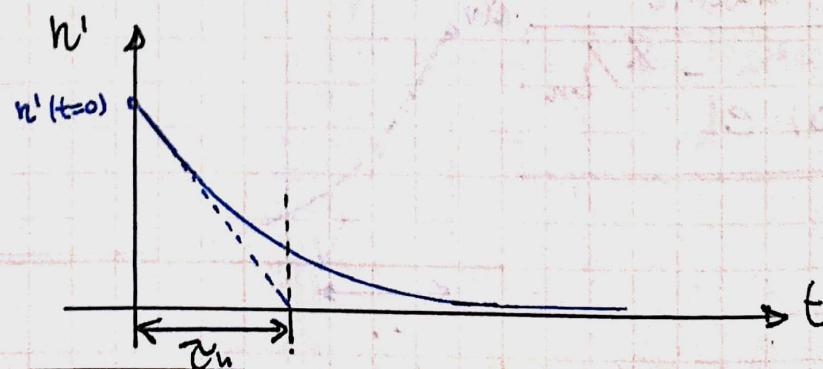
$$\frac{\partial h'}{\partial t} = 0 \quad D_n \frac{\partial^2 h'}{\partial x^2} = 0$$

(uniforme)

$$\rightarrow h(t=0) = g_h \tau_n$$

- spego irraggiamento:

$$\frac{\partial h'}{\partial t} = - \frac{h'}{\tau_n} \rightarrow h' = h'(t=0) e^{-\frac{t}{\tau_n}}$$



- se dovessimo raccordare l'irraggiamento bisogna aggiungere una terza condizione:

$$\frac{\partial n'}{\partial t} = g_n - \frac{n'}{\tau_n}$$

si ottiene

$$n'(t) = g_n \tau_n (1 - e^{-t/\tau_n})$$

↓  
VALORE  
A  
NETTONE

