

Appunti di Struttura della Materia

Edoardo Gabrielli

27 marzo 2020

Indice

1	Termodinamica	2
1.1	Lezione 14	2
1.1.1	Fluttuazioni nelle statistiche quantistiche	2
1.1.2	Fluttuazioni del numero medio di particelle per un insieme di stati	3
1.1.3	Significato fisico della correzione quantistica alle fluttuazioni	3
1.1.4	Numero di celle coinvolte nelle fluttuazioni del numero di fotoni	5
1.1.5	Esempio numerico di numero di celle occupate.	6
1.1.6	Coerenza dei fotoni ed esperimento di Young	6
1.1.7	Ottenere la coerenza dalla radiazione stellare	7
1.1.8	Correlazione tra fasci di particelle: esperimento di Hanbury Brown e Twiss.	8
1.1.9	Dinamica delle fluttuazioni: Rumore Jonshon nei circuiti elettrici	8
1.2	Lezione 15	10
1.2.1	Distribuzione spettrale delle fluttuazioni	10
1.2.2	Teorema di fluttuazione-dissipazione	10
1.2.3	Applicazione del teorema Fluttuazione-dissipazione al rumore Jonshon	13
1.2.4	Rumore shot	15
1.2.5	Introduzione ai solidi.	17
2	Solidi	19
2.1	Lezione 16	19
2.1.1	Reticoli nei solidi	20
2.1.2	Prima zona di Brilloiun	21
2.1.3	Osservazione della struttura periodica del cristallo	21
2.1.4	Teorema di Bloch	22

Capitolo 1

Termodinamica

1.1 Lezione 14

20-03-2020

1.1.1 Fluttuazioni nelle statistiche quantistiche

Abbiamo visto nella lezione 6 che le fluttuazioni del numero di particelle in un sistema possono essere espresse come nella ??:

$$\overline{(\Delta N)^2} = -kT \left. \frac{\partial^2 \Omega}{\partial \mu^2} \right|_{T,V}. \quad (1.1.1)$$

Il numero medio di particelle si esprime invece a partire dalla definizione di potenziale di Landau:

$$\bar{N} = - \left. \frac{\partial \omega}{\partial \mu} \right|_{T,V}. \quad (1.1.2)$$

Se applichiamo queste al singolo stato quantistico q avente la propria ω_q troviamo le fluttuazioni del numero di occupazione \bar{N} :

$$\overline{(\Delta n)^2} = kT \frac{\partial \bar{n}}{\partial \mu}. \quad (1.1.3)$$

Ovviamente stiamo parlando dell'Ensamble gran canonico. Sostituiamo a questo \bar{n} le funzioni di distribuzione discusse nelle lezioni precedenti:

$$\bar{n} = \frac{1}{e^{(\mathcal{E}-\mu)/kT} \pm 1}. \quad (1.1.4)$$

E facciamo la derivata per $\overline{(\Delta n)^2}$:

$$\begin{aligned} \overline{(\Delta n)^2} &= \frac{e^{(\mathcal{E}-\mu)/kT}}{(e^{(\mathcal{E}-\mu)/kT} \pm 1)^2} = \\ &= \frac{e^{(\mathcal{E}-\mu)/kT} + 1 - 1}{(e^{(\mathcal{E}-\mu)/kT} \pm 1)^2} = \\ &= \frac{1}{e^{(\mathcal{E}-\mu)/kT} \pm 1} \mp \frac{1}{(e^{(\mathcal{E}-\mu)/kT} \pm 1)^2} = \\ &= \bar{n}_q \mp \bar{n}_q^2. \end{aligned} \quad (1.1.5)$$

Per essere più espliciti possiamo scrivere che:

$$\overline{(\Delta n)^2} = \begin{cases} \bar{n}_q - \bar{n}_q^2 & \text{Fermi-Dirac} \\ \bar{n}_q + \bar{n}_q^2 & \text{Bose-einstein} \end{cases}. \quad (1.1.6)$$

Se la distribuzione fosse stata quella di Boltzmann avremmo ritrovato semplicemente:

$$\overline{(\Delta n)^2} = \bar{n} \quad (1.1.7)$$

Notiamo che le fluttuazioni sono maggiori nel caso della Bose-Einstein rispetto al caso della Fermi-Dirac. Nel caso della Fermi-Dirac si ha che $\bar{n}_q \leq 1$ per il principio di esclusione di Pauli, quindi sicuramente $\overline{(\Delta n)^2} \geq 0$. Per i bosoni invece si ha che le fluttuazioni sono maggiori che nel caso classico. Inoltre se $\bar{n}_q \gg 1$ allora per la Bose-Einstein $\overline{(\Delta n)^2} \propto \bar{n}_q^2$.

1.1.2 Fluttuazioni del numero medio di particelle per un insieme di stati

Prendiamo un insieme di g stati aventi tutti la stessa energia (si introduce così una degenerazione del numero di stati), le fluttuazioni del numero di particelle in questi stati saranno:

$$\overline{\Delta N^2} = -kT \left. \frac{\partial^2 \Omega_g}{\partial \mu^2} \right|_{T,V}. \quad (1.1.8)$$

Con Ω_g quello del gruppo di stati:

$$\Omega_g = \sum_{j=1}^{j=g} \Omega_j = g\Omega_q. \quad (1.1.9)$$

Quindi possiamo scrivere:

$$\begin{aligned} \overline{(\Delta N)^2} &= g \overline{(\Delta n)^2} = \\ &= g (\overline{n} \mp \overline{n}^2) = \\ &= \overline{N} \mp \frac{\overline{N}^2}{g}. \end{aligned} \quad (1.1.10)$$

Notiamo quindi che l'importanza della correzione diminuisce man a mano che prendiamo un numero di stati sempre maggiore, tale correzione è massima quando consideriamo la singola celletta dello spazio delle fasi.

1.1.3 Significato fisico della correzione quantistica alle fluttuazioni

Prendiamo un sistema composto da un numero di fotoni, per questo particolare sistema avremo che:

$$n = \langle |E|^2 \rangle. \quad (1.1.11)$$

Con n numero medio di fotoni e E ampiezza del campo elettromagnetico¹.

Di conseguenza cerchiamo di quantificare questa ampiezza del campo elettromagnetico per poi studiare le fluttuazioni quantistiche.

Supponiamo di avere il seguente apparato sperimentale:

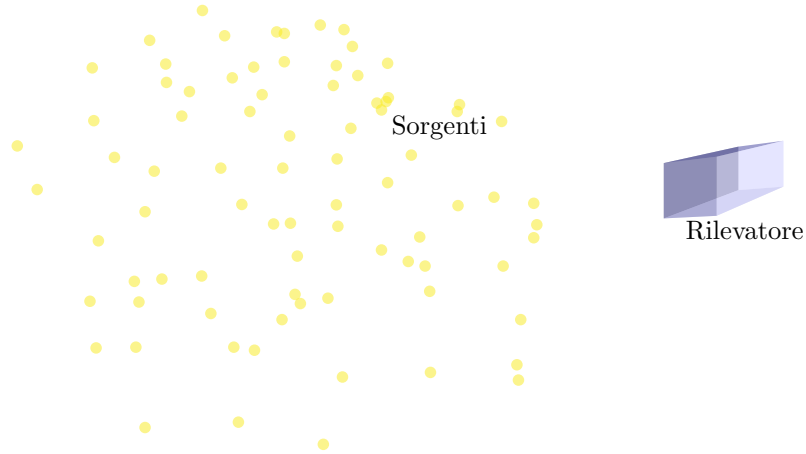


Figura 1.1: Sistema di N emettitori di fotoni con rivelatore, ogni emettitore ha una ampiezza di radiazione \mathcal{E} .

Al rivelatore arriverà la radiazione di ogni sorgente, ognuna avente la propria fase. Ne risulterà un campo elettrico:

$$E = \sum_j^N \mathcal{E} e^{i\varphi_j}. \quad (1.1.12)$$

Quindi si ha anche che:

$$\begin{aligned} |E|^2 &= \sum_j^N \mathcal{E} e^{i\varphi_j} \sum_l^N \mathcal{E} e^{-i\varphi_l} = \\ &= N\mathcal{E}^2 + \mathcal{E}^2 \sum_{j \neq l}^N e^{i(\varphi_j - \varphi_l)}. \end{aligned} \quad (1.1.13)$$

¹Questo lo si vede quando si va a studiare la seconda quantizzazione.

Se facciamo una media sull'Ensamble i termini con la fase si cancellano (essendo le fasi Random), quindi ci resta:

$$\langle |E|^2 \rangle = N\mathcal{E}^2. \quad (1.1.14)$$

Per quanto assunto ad inizio sezione avremo anche che:

$$\langle n \rangle = N\mathcal{E}^2. \quad (1.1.15)$$

Sappiamo che la fluttuazione del numero di particelle può essere scritta come:

$$\frac{\langle (\Delta n)^2 \rangle}{\langle n \rangle^2} = \frac{\langle n^2 \rangle - \langle n \rangle^2}{\langle n \rangle^2}. \quad (1.1.16)$$

Visto che $\langle n^2 \rangle = \langle |E|^4 \rangle$ ci conviene calcolarci questa quantità per trovare le fluttuazioni:

$$\begin{aligned} \langle |E|^4 \rangle &= \mathcal{E}^4 \left\langle \left[N + 2 \sum_{j>l}^N \cos(\varphi_j - \varphi_l) \right]^2 \right\rangle = \\ &= \mathcal{E}^4 \left[N^2 + 4N \left\langle \sum_{j>l}^N \cos(\varphi_j - \varphi_l) \right\rangle + 4 \left\langle \sum_{j>l}^N \cos^2(\varphi_j - \varphi_l) \right\rangle \right] = \\ &= \mathcal{E}^4 \left[N^2 + 4 \frac{N(N-1)}{2} \frac{1}{2} \right] = \\ &= 2N^2 \mathcal{E}^4. \end{aligned} \quad (1.1.17)$$

In questo modo abbiamo che:

$$\frac{\langle (\Delta n)^2 \rangle}{\langle n \rangle^2} = \frac{2N^2 \mathcal{E}^4 - N^2 \mathcal{E}^4}{N^2 \mathcal{E}^4} = 1. \quad (1.1.18)$$

In conclusione le fluttuazioni statistiche del numero medio di fotoni rilevate dal nostro rivelatore sono:

$$\langle (\Delta n)^2 \rangle = \langle n \rangle^2. \quad (1.1.19)$$

Confrontando questo termine con quanto osservato per la Bose-Einstein possiamo avere l'intuizione che, nel calcolo delle fluttuazioni, il termine $\langle n \rangle^2$ sia associato alla natura ondulatoria della materia, infatti lo abbiamo ricavato in questa sezione ragionando sulla interferenza dei fotoni, il termine \bar{n} invece può essere associato alla natura corpuscolare della materia.

Ipotizziamo di avere un sistema di particelle con $\bar{n} \gg 1$, in questo sistema il termine classico (o corpuscolare) di fluttuazioni può essere trascurato, se riuscissi a misurare questo numero di particelle otterrei un numero di particelle nel range:

$$\begin{aligned} n_{\min} &= \bar{n} - \sqrt{(\Delta n)^2} = 0 \\ n_{\max} &= \bar{n} + \sqrt{(\Delta n)^2} = 2\bar{n}. \end{aligned} \quad (1.1.20)$$

L'ampiezza di queste fluttuazioni può essere identificata da un parametro detto contrasto:

$$C = \frac{I_{\max} - I_{\min}}{I_{\max} + I_{\min}} = \frac{n_{\max} - n_{\min}}{n_{\max} + n_{\min}}. \quad (1.1.21)$$

Come si nota il contrasto può essere definito in termini di intensità (d'onda) oppure in termini di numero di particelle. Nel caso appena analizzato abbiamo ovviamente che $C = 1$.

Se invece di considerare una sola celletta dello spazio delle fasi (adesso lo abbiamo implicitamente fatto prendendo fotoni tutti uguali) raccogliamo fotoni provenienti da g celle diverse abbiamo visto che le fluttuazioni scalano con g dalla 1.1.10, quindi avremo anche che:

$$\begin{aligned} N_{\min} &= \bar{N} - \frac{\bar{N}}{\sqrt{g}} \\ N_{\max} &= \bar{N} + \frac{\bar{N}}{\sqrt{g}}. \end{aligned} \quad (1.1.22)$$

Di conseguenza il contrasto sarà:

$$C = \frac{1}{\sqrt{g}}. \quad (1.1.23)$$

Quindi per riuscire a vedere le fluttuazioni quantistiche è necessario prendere fotoni che stiano il più possibile nella stessa cella nello spazio delle fasi, più coinvolgiamo fotoni da altre celle e meno saremo in grado di vedere tale effetto.

Fatto 1.1: Controintuitività delle fluttuazioni quantistiche

Più celle dello spazio delle fasi coinvolgiamo nel nostro esperimento e meno fluttuazioni saremo in grado di vedere.

1.1.4 Numero di celle coinvolte nelle fluttuazioni del numero di fotoni

Calcoliamo g in funzione di parametri fisici del sistema per poter prevedere se le fluttuazioni quantistiche saranno significative nel numero dei fotoni nelle varie situazioni. Possiamo esprimere g come volumetto dello spazio delle fasi:

$$g = \frac{\Delta\Omega V p^2 dp}{h^3}. \quad (1.1.24)$$

Con $\Delta\Omega$ frazione di angolo solido dalla quale noi raccogliamo fotoni, V volume spaziale in cui si raccolgono fotoni e p impulso di questi ultimi.

Fissiamo le idee con il seguente apparato preso in considerazione è il seguente:

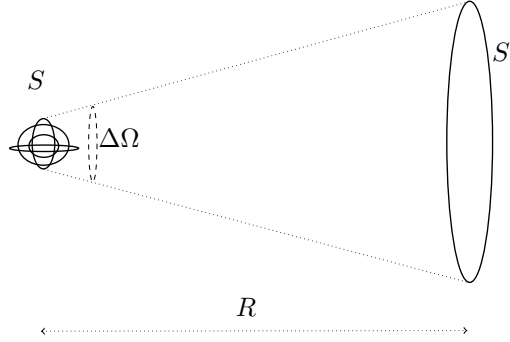


Figura 1.2: Fotoni da una superficie S raccolti a S'

Il "volume" di fotoni raccolti sarà dato da:

$$V = ScT. \quad (1.1.25)$$

Dove T è il tempo in cui abbiamo rilevato i fotoni arrivare in S' . Sappiamo che per i fotoni vale:

$$p = \frac{h\nu}{c}. \quad (1.1.26)$$

Sappiamo inoltre che Δp è legato quantisticamente alla larghezza spettrale della nostra sorgente $\Delta\nu$, sfruttiamo la relazione tra questi due per riscrivere g .

I fotoni saranno suddivisi in pacchetti aventi un tempo di coerenza τ_c , questo corrisponde al reciproco dell'ampiezza un frequenza secondo la trasformata di Fourier:

$$\Delta\nu \sim \frac{1}{\tau_c}. \quad (1.1.27)$$

Con le ultime due possiamo riscrivere il differenziale dell'impulso come:

$$\Delta p = \frac{h}{c} \Delta\nu \sim \frac{1}{\tau_c}. \quad (1.1.28)$$

Riscriviamo il numero di cellette dello spazio delle fasi (o stati energetici dei fotoni coinvolti) g :

$$\begin{aligned} g &= \frac{\Delta\Omega V p^2 dp}{h^3} = \\ &= \frac{\Delta\Omega ScT}{h^3} \frac{h^2}{\lambda^2} \frac{h}{c\tau_c} = \\ &= \frac{\Delta\Omega S}{\lambda^2} \frac{T}{\tau_c}. \end{aligned} \quad (1.1.29)$$

In questa possiamo notare il rapporto tra il tempo di coerenza dei fotoni ed il tempo di osservazione, per avere g più piccolo possibile sarà intanto necessario rendere questo rapporto il più vicino possibile all'unità.

L'ordine di grandezza dei tempi di coerenza è:

- Per una lampada $\tau_c \sim \text{ns}$, quindi $\Delta\nu \sim 10^9 \text{ Hz}$.
- Per un laser $\tau_c \sim \text{ms}$ e $\Delta\nu \sim 10^3 \text{ Hz}$.

Concentriamoci adesso sulla parte spaziale dell'espressione e vediamo se può essere scritta in modo da darci informazioni utili su g .

Riscriviamo $\Delta\Omega$ in funzione dei parametri fisici del nostro apparato:

$$\Delta\Omega \propto \frac{S'}{R^2}. \quad (1.1.30)$$

Introduciamo anche un parametro superficiale detta *Estensione del fascio*:

$$U = \Delta\Omega S. \quad (1.1.31)$$

Questa estensione, vista la $\Delta\Omega$ scritta sopra, può essere espresso come:

$$U = \frac{SS'}{R^2}. \quad (1.1.32)$$

La sorgente di superficie S solitamente avrà una espansione angolare del tipo ²:

$$\Delta\Omega \sim \frac{\lambda^2}{S}. \quad (1.1.33)$$

Quindi abbiamo una estensione del fascio critica U_c :

$$U_c \sim \lambda^2. \quad (1.1.34)$$

Un rivelatore che riesca a raccogliere fotoni con una estensione di queste dimensioni sicuramente raccoglierà fotoni aventi tutti la stessa energia poichè provenienti dallo stesso pacchetto coerente, vediamo infatti che la g si riscrive come:

$$g = \frac{U}{U_c} \frac{T}{\tau_c}. \quad (1.1.35)$$

Abbiamo quindi un numero di celle che è frutto del prodotto di una coerenza spaziale ed una coerenza temporale.

1.1.5 Esempio numerico di numero di celle occupate.

Quindi abbiamo che la condizione $U/U_c \sim 1$ equivale alla condizione che si ha per vedere le frange di interferenza nell'esperimento di Young.

Facciamo un esempio numerico: se prendo $\lambda \sim \text{nm}$ ho che $U_c \sim 10^{10} \text{ cm}^2$. Se prendiamo una lampadina di dimensioni superficiali del $\sim \text{mm}^2$ ed un rivelatore di $\sim \text{cm}^2$ ed otteniamo $U \sim 10^{-6} \text{ cm}^2$. Di conseguenza in questo caso avremmo nella migliore delle ipotesi $U/U_c \sim 400 \sim g$. Possiamo scordarci le frange di interferenza con 400 cellette occupate.

1.1.6 Coerenza dei fotoni ed esperimento di Young

Nell'esperimento di Young, schematizzato in Figura 1.3 il rapporto U/U_c si scrive come:

$$\frac{U}{U_c} = \frac{S'}{A_c}. \quad (1.1.36)$$

Dove A_c è una superficie critica che ricaviamo sotto.

²Questo è l'angolo solido sotto al quale tipicamente viene sparpagliata la radiazione dalla sorgente.

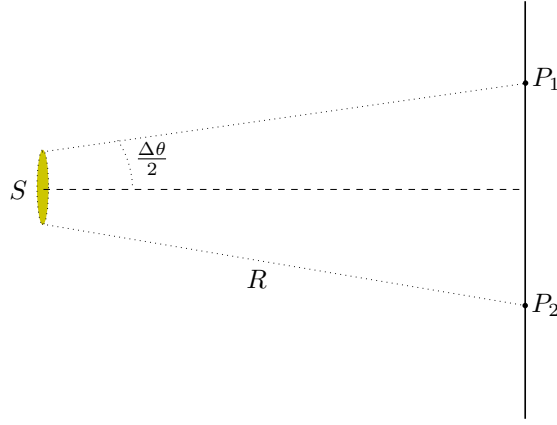


Figura 1.3: Esperimento di Young, P_1 e P_2 sono le due fenditure.

La condizione per riuscire a vedere le frange di interferenza è:

$$\Delta\theta S \lesssim \lambda. \quad (1.1.37)$$

Questo significa che i punti P_i devono stare all'interno di un'area critica per poter vedere le frange di interferenza, questa area critica è:

$$A_c \simeq (R\Delta\theta)^2 = \frac{R^2\lambda^2}{S^2}. \quad (1.1.38)$$

1.1.7 Ottenere la coerenza dalla radiazione stellare

e si utilizza come sorgente la radiazione stellare si hanno $\Delta\Omega$ (quindi anche U) molto più piccoli rispetto a qualunque sorgente che possiamo costruire sulla terra.

Con queste sorgenti possiamo avere una estensione del fascio simile a quella di coerenza. L'idea di questi esperimenti era la seguente:

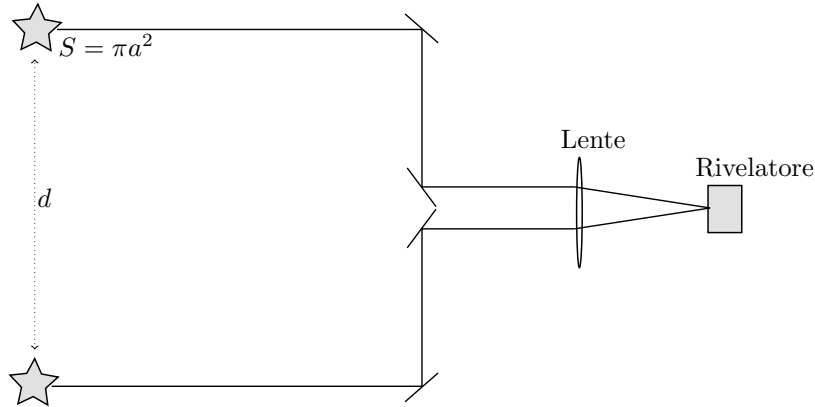


Figura 1.4: Esperimento per raccogliere la radiazione stellare

Per poter vedere interferenza dal nostro apparato dobbiamo avere:

$$\begin{aligned} d &< \sqrt{A_c} = \\ &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{R\lambda}{a}. \end{aligned} \quad (1.1.39)$$

Se trovassimo il modo di far variare d potremmo avere una misura del rapporto tra la distanza e le dimensioni della stella, anche detto parametro angolare della stella:

$$\alpha = \frac{a}{R}. \quad (1.1.40)$$

Ovviamente non si può far variare la distanza tra le due stelle, tuttavia è possibile costruire due fotomoltiplicatori che raccolgono la radiazione dalla stella e la amplificano verso il rivelatore nel percorso di Figura 1.4.

1.1.8 Correlazione tra fasci di particelle: esperimento di Hanbury Brown e Twiss.

Gli esperimenti sulla radiazione stellare vennero resi più sofisticati da Hanbury Brown e Twiss che studiarono la radiazione proveniente da Sirio.

Il loro scopo era una misura della correlazione tra i fotoni provenienti da questa stella raccolti da due fotomoltiplicatori disposti sempre come in Figura 1.4 (ovviamente al posto della stella c'è il fotomoltiplicatore).

Se nominiamo i due fotomoltiplicatori con il pedice 1 e 2 allora possiamo definire la correlazione tra il numero dei conteggi di fotoni di questi due strumenti come:

$$C = \overline{(N_1 - \bar{N}_1)(N_2 - \bar{N}_2)}. \quad (1.1.41)$$

Supponiamo di essere all'interno del diametro di coerenza avremo che $g = T/\tau_c$, quindi sappiamo che le fluttuazioni di misura dei fotomoltiplicatori saranno:

$$\begin{aligned} \overline{(N_1 - \bar{N}_1)^2} &= \bar{N}_1 + \frac{(\bar{N}_1)^2}{g} \\ \overline{(N_2 - \bar{N}_2)^2} &= \bar{N}_2 + \frac{(\bar{N}_2)^2}{g}. \end{aligned} \quad (1.1.42)$$

Anche il numero totale di fotoni avrà la stessa tipologia di fluttuazioni:

$$\overline{(N_1 + N_2 - \bar{N}_1 - \bar{N}_2)^2} = \bar{N}_1 + \bar{N}_2 + \frac{(\bar{N}_1 + \bar{N}_2)^2}{g}. \quad (1.1.43)$$

Sviluppiamo adesso i quadrati a destra e semplifichiamo quest'ultima espressione:

$$\overline{(N_1 - \bar{N}_1)^2} + \overline{(N_2 - \bar{N}_2)^2} + 2\overline{(N_1 - \bar{N}_1)(N_2 - \bar{N}_2)} = \cancel{\bar{N}_1} + \cancel{\bar{N}_2} + \frac{\cancel{\bar{N}_1^2}}{g} + \frac{\cancel{\bar{N}_2^2}}{g} + 2\frac{\bar{N}_1\bar{N}_2}{g}. \quad (1.1.44)$$

Abbiamo in conclusione che la correlazione tra i numeri medi registrati dai due fotomoltiplicatori sarà:

$$\bar{C} = \frac{\bar{N}_1\bar{N}_2}{g}. \quad (1.1.45)$$

Ricordiamo che in questo caso abbiamo assunto la totale coerenza spaziale, quindi la g nella formula sarà la sola coerenza temporale.

Potremmo anche fare il caso opposto: teniamo la distanza tra i fotomoltiplicatori costanti ed inseriamo una asincronicità τ nella misura tra i due strumenti, in questo modo la correlazione sarebbe:

$$\bar{C}(\tau) = \overline{(N_1(\tau) - \bar{N}_1)(N_2(\tau + \bar{c}) - \bar{N}_2)}. \quad (1.1.46)$$

Inoltre nel caso dei fermioni la correlazione media ha il segno opposto a quella calcolata adesso, questo significa che se un rivelatore riceve un numero superiore alla media di fermioni allora l'altro sicuramente ne riceve meno, viceversa con i bosoni.

1.1.9 Dinamica delle fluttuazioni: Rumore Jonshon nei circuiti elettrici

Misurano una differenza di potenziale ai capi di una resistenza R con un multimetro molto sensibile siamo in grado di rilevare delle piccole oscillazioni del valore misurato, queste corrispondono al rumore Jonshon.

Le misure effettuate da Jonshon concluderò che, per uno strumento che misura in una ampiezza di banda Δf si ha:

$$\overline{V^2}_{\Delta f} = 4Rk_B T \Delta f. \quad (1.1.47)$$

Notiamo che, se non si applica esternamente alcuna ddp al sistema si ha anche che ($\bar{V} = 0$):

$$\overline{V^2}_{\Delta f} = \overline{(\Delta V)^2} = \bar{V^2}. \quad (1.1.48)$$

Il fenomeno ha una dimostrazione macroscopica dovuta a Nyquist che aggira il conto statistico. Per far questo Nyquist considera la seguente linea di trasmissione:

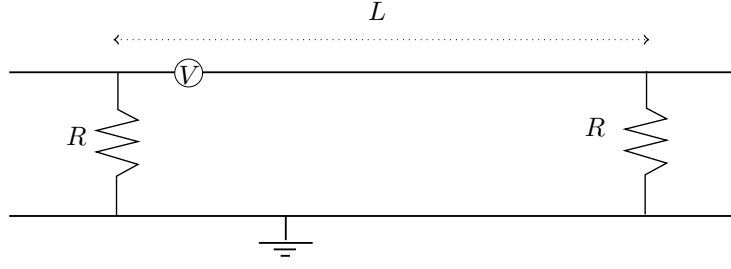


Figura 1.5: Linea di trasmissione di Nyquist

L'ipotesi di Nyquist consisteva nel considerare le resistenze all'equilibrio termodinamico con il campo elettromagnetico presente nella linea. Si può allora calcolare la potenza del campo elettromagnetico all'interno della linea, questa sarà data dalla teoria del corpo nero.

All'equilibrio tanta potenza viene assorbita dalle resistenze tramite effetto Joule quanta ne viene emessa dal campo elettromagnetico all'interno della linea. Quindi anche le mie resistenze saranno in grado di emettere radiazione per effetto Joule, questo effetto sarà allora caratteristico della agitazione termica del materiale che compone la resistenza stessa.

Imponendo quindi l'equilibrio sul sistema troveremo la potenza dissipata per effetto joule dal sistema e questa sarà proprio la potenza di rumore.

Consideriamo le onde EM all'interno della linea di trasmissione, la loro lunghezza d'onda sarà quantizzata:

$$L = n \frac{\lambda}{2}. \quad (1.1.49)$$

con $\lambda = c/\nu$, c è la velocità di propagazione nella linea. La lunghezza della linea di trasmissione sarà data da:

$$L = n \frac{c}{2\nu} \implies \nu = n \frac{c}{2L}. \quad (1.1.50)$$

Quindi in un intervallo di frequenze $\Delta\nu$ avremo un numero di modi:

$$m = \frac{2L}{c} \Delta\nu. \quad (1.1.51)$$

Ogni modo alla frequenza ν avrà una energia:

$$h\nu \bar{n} = h\nu \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1}. \quad (1.1.52)$$

Il rumore Jonshon si manifesta a basse frequenze, possiamo tranquillamente assumere $h\nu/kT \ll 1$. Sviluppiamo allora la Bose-Einstein:

$$h\nu \bar{n} \sim kT. \quad (1.1.53)$$

L'energia contenuta nell'intervallo di frequenze $\Delta\nu$ sarà:

$$E_{\Delta\nu} \approx k_B T \frac{2L}{c} \Delta\nu. \quad (1.1.54)$$

Il tempo che questa energia impiega ad arrivare alle due resistenze sarà $t \approx L/c$, quindi abbiamo che la potenza media che arriva alle due resistenze è:

$$P_{\Delta\nu} = k_B T \Delta\nu. \quad (1.1.55)$$

Questa deve essere la stessa che la nostra resistenza genera per effetto Joule:

$$I^2 R = k_B T \Delta\nu. \quad (1.1.56)$$

Quindi il potenziale $V_{\Delta\nu}$ di rumore nella nostra resistenza deve essere:

$$V_{\Delta\nu} = 2RI. \quad (1.1.57)$$

Sostituendo con l'uguaglianza sopra abbiamo:

$$\overline{V_{\Delta\nu}^2} = 4Rk_B T \Delta\nu. \quad (1.1.58)$$

Che è proprio il risultato che si ottiene anche sperimentalmente.

1.2 Lezione 15

23-03-2020

1.2.1 Distribuzione spettrale delle fluttuazioni

Supponiamo di avere la tensione di rumore ai capi di una resistenza $V(t)$, effettuiamo una misura di tale tensione in un tempo T . Sviluppiamo tale tensione nelle sue componenti spettrali:

$$V(t) = \sum_{n=1}^{\infty} (a_n \cos(2\pi f_n t) + b_n \sin(2\pi f_n t)). \quad (1.2.1)$$

Dove $f_n = n/T$. Supponiamo che per $n = 0$ si abbia $\overline{V(t)} = 0$ (mediato nel tempo).
La notazione che adotteremo per questa lezione è:

- \bar{x} : media temporale di x .
- $\langle x \rangle$: media statistica di x .

La potenza dissipata nella resistenza sarà:

$$P_{\text{diss}} = \frac{V^2(t)}{R}. \quad (1.2.2)$$

Separando la potenza media relativa alla frequenza n -esima:

$$\begin{aligned} P_n &= \frac{(a_n \cos(2\pi f_n t) + b_n \sin(2\pi f_n t))^2}{R} = \\ &= \frac{1}{2R} (a_n^2 + b_n^2). \end{aligned} \quad (1.2.3)$$

Quindi la notazione per fare anche la media statistica sarà la seguente:

$$\langle P_n \rangle = \frac{1}{R} \frac{\langle a_n^2 \rangle + \langle b_n^2 \rangle}{2}. \quad (1.2.4)$$

Quindi la potenza totale dissipata di rumore si potrà esprimere come:

$$\frac{\langle \overline{V^2(t)} \rangle}{R} = \sum_n P_n. \quad (1.2.5)$$

Definizione 2.1: Densità spettrale di rumore

La densità spettrale di rumore $G(f_n)$ nell'intervallo di frequenze: $\Delta f = (n - 1/2)/T$ e $(n + 1/2)/T$ è definita come il valor medio dei quadrati delle ampiezze delle componenti di Fourier, nel nostro caso:

$$G(f_n) \Delta f = \frac{\langle a_n^2 \rangle + \langle b_n^2 \rangle}{R}. \quad (1.2.6)$$

Nel caso del rumore Jonson dobbiamo arrivare a dimostrare che $G(f) = 4k_B T$.
Utilizzando questa nuova definizione possiamo riscrivere:

$$\frac{\langle \overline{V^2(t)} \rangle}{R} = \sum_n G(f_n) \Delta f. \quad (1.2.7)$$

1.2.2 Teorema di fluttuazione-dissipazione

Sia $x(t)$ una variabile tale che

$$x(t) \neq 0 \iff -\frac{T}{2} < t < \frac{T}{2}. \quad (1.2.8)$$

scriviamo la sua trasformata di Fourier:

$$x(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \hat{x}_T(f) e^{2\pi i f t} df. \quad (1.2.9)$$

Supponiamo che $x(t)$ sia una grandezza reale:

$$\begin{aligned} x(t) &= x^*(t) = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \hat{x}_T^*(f) e^{-2i\pi f t} df = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \hat{x}_T^*(-f) e^{2i\pi f t} df. \end{aligned} \quad (1.2.10)$$

Di conseguenza abbiamo che:

$$\hat{x}_T(f) = \hat{x}_T^*(-f). \quad (1.2.11)$$

Che può anche essere riparafrasato dicendo che $|\hat{x}_T(f)|^2$ è pari.

Appllichiamo adesso il teorema di Parseval:

$$\begin{aligned} \int_{-T/2}^{T/2} x^2(t) dt &= \int_{-\infty}^{\infty} |\hat{x}_T(f)|^2 df = \\ &= 2 \int_0^{\infty} |\hat{x}_T(f)|^2 df. \end{aligned} \quad (1.2.12)$$

Mediamo temporalmente:

$$\begin{aligned} \overline{x^2} &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} x^2(t) dt = \\ &= \lim_{T \rightarrow \infty} \int_0^{\infty} |\hat{x}_T(f)|^2 df. \end{aligned} \quad (1.2.13)$$

Facciamo anche la media statistica:

$$\begin{aligned} \langle \overline{x} \rangle &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{2}{T} \int_0^{\infty} \langle |\hat{x}_T(f)|^2 \rangle df = \\ &= \int_0^{\infty} \underbrace{\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{2}{T} \langle |\hat{x}_T(f)|^2 \rangle}_{G(f)} df. \end{aligned} \quad (1.2.14)$$

In conclusione abbiamo trovato una versione più generale di $G(f)$:

$$\langle \overline{x} \rangle = \int_0^{\infty} G(f) df. \quad (1.2.15)$$

Il teorema di fluttuazione dissipazione ci lega la densità spettrale con la funzione di correlazione:

Definizione 2.2: Funzione di correlazione

La funzione di correlazione per una grandezza $x(t)$ dipendente dal tempo è:

$$c(\tau) = \overline{\langle x(t)x(t+\tau) \rangle}. \quad (1.2.16)$$

Vediamo il legame di questa quantità con la densità spettrale esplicitando $c(\tau)$:

$$\begin{aligned}
c(\tau) &= \overline{\langle x(t)x(t+\tau) \rangle} = \\
&= \left\langle \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} x(t)x(t+\tau) dt \right\rangle = \\
&= \left\langle \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{-\infty}^{\infty} df \int_{-\infty}^{\infty} df' \int_{-T/2}^{T/2} dt \hat{x}_T(f) e^{2i\pi f t} \cdot \hat{x}_T(f') e^{2i\pi f'(t+\tau)} \right\rangle = \\
&= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{-\infty}^{\infty} df' e^{i2\pi f' \tau} \int_{-\infty}^{\infty} df \hat{x}_T(f) \hat{x}_T(f') \underbrace{\int_{-T/2}^{T/2} e^{2\pi i(f+f')t} dt}_{\delta(f+f')} = \\
&= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{\hat{x}_T(f') \hat{x}_T(-f')}_{|\hat{x}_T(f)|^2} e^{2i\pi f' \tau} df' = \\
&= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{-\infty}^{\infty} |\hat{x}_T(f')|^2 e^{2\pi i f' \tau} df' = \\
&= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{2}{T} \int_0^{\infty} |\hat{x}_T(f)|^2 \cos(2\pi f \tau) df.
\end{aligned} \tag{1.2.17}$$

Quindi per come abbiamo definito la $G(f)$ si ha una espressione del teorema di fluttuazione-dissipazione:

Fatto 2.1: Teorema di Fluttuazione-dissipazione

La relazione tra densità spettrale delle fluttuazioni e la correlazione temporale (contenente informazioni sulla dissipazione del sistema) è data da:

$$c(\tau) = \int_0^{\infty} G(f) \cos(2\pi f \tau) df. \tag{1.2.18}$$

O dalla sua inversa:

$$G(f) = 4 \int_0^{\infty} c(\tau) \cos(2\pi f \tau) d\tau. \tag{1.2.19}$$

Un esempio di caso tipico dissipativo ha una correlazione temporale di tipo esponenziale.

$$c(\tau) = c(0) e^{-\tau/\tau_c}. \tag{1.2.20}$$

Dove τ_c è una costante temporale che misura il tempo in cui si perde la correlazione della grandezza fisica in questione³.

Nel caso degli elettroni in un metallo il τ_c ci fa perdere la correlazione sulla velocità degli elettroni: dopo un tempo τ_c la velocità di ogni elettrone è completamente scorrelata da quella che aveva un τ_c prima.

Assuendo questa correlazione di decadimento esponenziale troviamo la densità spettrale di rumore:

$$\begin{aligned}
G(f) &= 4 \int_0^{\infty} c(0) e^{-\tau/\tau_c} \cos(2\pi f \tau) d\tau = \\
&= 4c(0) \frac{1/\tau_c}{1/\tau_c^2 + 4\pi^2 f^2} = \\
&= \frac{4c(0)\tau_c}{1 + (2\pi f \tau_c)^2}.
\end{aligned} \tag{1.2.21}$$

Dove si è usato il noto integrale

$$\int_0^{\infty} e^{-ax} \cos(mx) dx = \frac{a}{a^2 + m^2}. \tag{1.2.22}$$

La densità spettrale della Equazione 1.2.21 ha l'andamento di Figura 1.6. Quindi se ho una grandezza con un tempo di correlazione τ_c allora le componenti spettrali del rumore conterranno tutte le frequenze inferiori a $1/2\pi\tau_c$ e non le superiori.

Notiamo che questo è un comportamento generale per tutti i sistemi aventi correlazione che decade esponenzialmente nel tempo⁴.

³Nel caso degli elettroni in una resistenza sarà indice delle collisioni con i fononi, delle impurezze, dei difetti, del reticolo.

⁴Nel corso di Fondamenti di interazione Radiazione-Materia si può approfondire il fatto che è lo stesso tipo di comportamento che si ha per la luce caotica emessa nei processi di emissione spontanea.

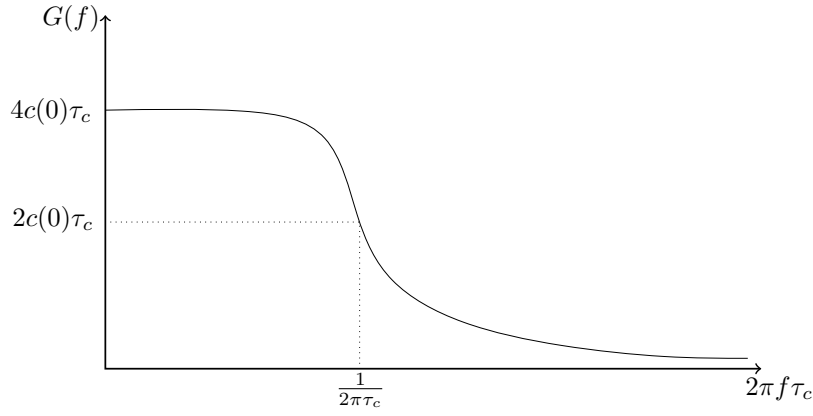


Figura 1.6: Densità spettrale per una correlazione esponenziale

1.2.3 Applicazione del teorema Fluttuazione-dissipazione al rumore Jonshon

Per il rumore Jonshon abbiamo trovato una $G(f) = 4k_B T$ indipendente dalla frequenza, ricordiamo che il regime di applicazione di quest'ultima era $hf \ll kT$.

Il regime in cui vale il rumore Jonshon trovato nella lezione precedente era quindi quello con $f \ll 1/2\pi\tau_c$, dove adesso τ_c è il tempo di correlazione degli elettroni in un metallo che può essere addirittura dell'ordine del ps (quindi a meno di lavorare con le decine di GHz, cosa molto difficile in elettronica, l'approssimazione è sensata). Supponiamo di essere in un regime classico ($\bar{n} \ll 1$) e adottiamo la seguente notazione:

- n : Densità di elettroni.
- S : Area della resistenza.
- l : La lunghezza della resistenza.
- R : La resistenza.
- σ : La conducibilità della resistenza.
- τ_c : Il tempo collisionale degli elettroni.

Il numero totale di elettroni sarà:

$$N = Sln. \quad (1.2.23)$$

Usando il modello classico della conducibilità di Drude la variazione di velocità sarà:

$$\Delta v_x = \frac{eE\tau_c}{m}. \quad (1.2.24)$$

Quindi avremo una corrente:

$$\begin{aligned} J &= e\Delta v_x n = \\ &= \underbrace{\frac{e^2 n \tau_c}{m}}_{\sigma} E = \\ &= \sigma E. \end{aligned} \quad (1.2.25)$$

La resistenza invece può essere scritta come:

$$R = \frac{l}{S\sigma} = \frac{lm}{ne^2\tau_c S}. \quad (1.2.26)$$

Per quanto riguarda il potenziale applicato si ha:

$$\begin{aligned}
V &= RI = \\
&= RSJ = \\
&= RSne\Delta v_x = \\
&= \frac{Re}{l} Vn\Delta v_x = \\
&= \frac{Re}{l} \sum_{i=1}^N \Delta v_{x,i} = \\
&= \sum_{i=1}^N V_i = \\
&= 0.
\end{aligned} \tag{1.2.27}$$

Dove abbiamo assunto che gli elettroni non debbano avere necessariamente tutti la stessa velocità, questo discostamento dal modello classico di Drude è ovviamente necessario per la nostra analisi. Inoltre visto che non si applica alcun campo esterno si ha ovviamente un segnale a media nulla, a noi interessano le fluttuazioni di questo segnale.

Il valore che cerchiamo è lo scarto quadratico medio:

$$\overline{V_{\Delta f}^2} = \sum_{i=1}^N \frac{R^2 e^2}{l^2} G_i(f) \Delta f. \tag{1.2.28}$$

Dove $G_i(f)$ è la densità spettrale delle velocità $v_{x,i}$ degli elettroni.

La funzione di correlazione per le velocità sarà invece:

$$c(\tau) = \langle v_{x,i}(t) v_{x,i}(t + \tau) \rangle = v_{x,i}^2 e^{-t/\tau_c}. \tag{1.2.29}$$

Applicando il teorema di fluttuazione-dissipazione:

$$G_i(f) = \frac{4 \langle v_{x,i}^2 \rangle \tau_c}{1 + (2\pi f \tau_c)^2} \stackrel{f\tau_c \ll 1}{=} 4 \langle v_{x,i}^2 \rangle \tau_c. \tag{1.2.30}$$

Essendo all'equilibrio termodinamico avremo anche che:

$$\left\langle \frac{mv_{x,i}^2}{2} \right\rangle = \frac{k_B T}{2}. \tag{1.2.31}$$

Per cui riscrivendo l'equazione precedente:

$$G_i(f) = 4 \frac{k_B T}{m} \tau_c. \tag{1.2.32}$$

Il potenziale medio nell'intervallo di frequenze Δf è dato da:

$$\begin{aligned}
\overline{V^2}_{\Delta f} &= \sum_{i=1}^N \frac{R^2 e^2}{l^2} 4 \frac{k_B T}{m} \tau_c \Delta f = \\
&= n l S \frac{R e^2}{l^2} \frac{l m}{e^2 n S \tau_c} 4 \frac{k_B T}{m} \tau_c \Delta f = \\
&= 4 R k_B T \Delta f.
\end{aligned} \tag{1.2.33}$$

Questa è proprio la formula di Nyquist che avevamo dimostrato imponendo l'equilibrio termodinamico tra il campo elettromagnetico e le resistenze.

Tale risultato resta valido per qualunque statistica, non solo per la Boltzmann che abbiamo invece assunto qui. Dimostriamo quest'ultima affermazione con un ragionamento termodinamico: supponiamo di avere un circuito all'equilibrio termico come in Figura 1.7. In tale circuito dobbiamo immaginare una resistenza che segue la statistica di Boltzmann ed una che segue invece la statistica di Fermi-Dirac.

Abbiamo già discusso la resistenza alla Boltzmann, per questa possiamo dire che:

$$\overline{I^2}_{B,\Delta f} = \frac{\overline{V^2}_{B,\Delta f}}{(R_{MB} + R_{FD}) s^2}. \tag{1.2.34}$$

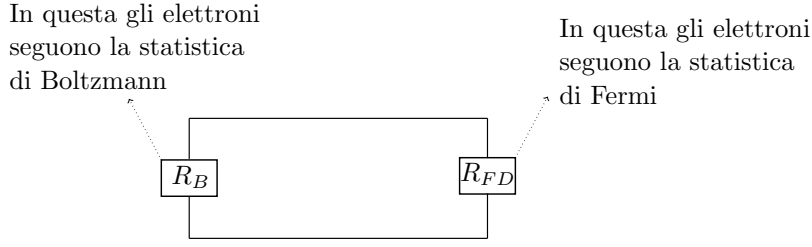


Figura 1.7: Circuito alternativo per dimostrare Nyquist

Quindi la potenza dissipata sulla resistenza Fermi-Dirac sarà data da:

$$P_{FD,\Delta f} = R_{FD} \frac{\overline{V}_{B,\Delta f}^2}{(R_B + R_{FD})^2}. \quad (1.2.35)$$

Potremmo invertire il ragionamento prendendo la densità di rumore generata dalla resistenza Fermi-Dirac, trovare la corrente generata da questa e successivamente la potenza dissipata nella resistenza classica da tale corrente. In questo modo si troverebbe:

$$P_{B,\Delta f} = \frac{R_B \overline{V}_{FD,\Delta f}^2}{(R_B + R_{FD})^2}. \quad (1.2.36)$$

All'equilibrio termodinamico le due potenze dissipate devono essere le stesse, quindi abbiamo che:

$$\frac{\overline{V}_{B,FD}^2}{R_B} = \frac{\overline{V}_{FD,\Delta f}^2}{R_{FD}} = 4k_B T \Delta f. \quad (1.2.37)$$

1.2.4 Rumore shot

A correnti piccole abbiamo anche un altro tipo di rumore, questo si ha per le correnti che rendono evidente la natura corpuscolare degli elettroni. Se mi immagino un filo percorso da una piccola corrente e ne taglio una sezione trasversale ho che gli elettroni la attraversano a tempi diversi, distribuiti più o meno casualmente. Quindi non ho un flusso uniforme di elettroni e questo può generare la forma di rumore detta rumore Shot.

Distribuzione temporale del rumore Shot.

Chiamiamo il tempo di misura T_m , se faccio l'esperimento n volte passano in media $\langle n \rangle$ elettroni, allora la corrente media sarà:

$$\langle I \rangle = \langle n \rangle \frac{e}{T_m}. \quad (1.2.38)$$

Di conseguenza lo scarto quadratico medio della corrente è sicuramente legato a quello del numero di particelle:

$$\langle (\Delta I)^2 \rangle \sim \langle (n)^2 \rangle. \quad (1.2.39)$$

Possiamo stimare lo SQM sulla corrente suddividendo in N intervalli il nostro tempo di misura T_m in modo tale che in ogni intervallo possa passare al massimo un elettrone.

Chiamiamo P la probabilità che un elettrone passi in un determinato intervallino T_m/N . La probabilità di avere n elettroni nel tempo di misura T_m sarà:

$$P(n, T_m) = \binom{N}{n} P^n (1 - P)^{N-n}. \quad (1.2.40)$$

Dove abbiamo seguito le regole della distribuzione binomiale. Visto che nel nostro caso si ha:

$$\begin{aligned} N &\gg 1 \\ P &\ll 1. \end{aligned} \quad (1.2.41)$$

La prima è ovvia, la seconda deriva dal fatto che il numero medio di elettroni è dato da $NP = \langle n \rangle$ e deve rimanere finito.

Con queste approssimazioni la distribuzione di probabilità è approssimabile con una Poissoniana:

$$P(n, T) = \frac{\langle n \rangle^n}{n!} e^{-\langle n \rangle}. \quad (1.2.42)$$

Per la distribuzione Poissoniana sappiamo anche che:

$$\langle (\Delta n)^2 \rangle = \langle n \rangle. \quad (1.2.43)$$

Quest'ultima ci dà le fluttuazioni nel numero medio di particelle per una poissoniana:

$$\frac{\langle (\Delta n)^2 \rangle}{\langle n \rangle^2} = \frac{1}{\langle n \rangle}. \quad (1.2.44)$$

In questo modo abbiamo anche risolto per la corrente:

$$\frac{\langle (\Delta I)^2 \rangle}{\langle I \rangle^2} = \frac{e}{T_m \langle I \rangle}. \quad (1.2.45)$$

E quindi:

$$\langle (\Delta I)^2 \rangle = \frac{e}{T_m} \langle I \rangle. \quad (1.2.46)$$

Questa è una caratteristica del rumore shot: la fluttuazione quadratica media della corrente va come la media della corrente stessa. È anche proporzionale alla carica dell'elettrone. Facciamo un esempio numerico per valutare l'ampiezza di questo rumore:

- $e = 1.6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$.
- $\langle I \rangle \sim \text{mA}$.
- $T_m \sim \text{s}$.

Con questi parametri si ha $\sqrt{\langle (\Delta I)^2 \rangle} \sim 10 \mu \text{ A}$, questo è un numero piccolo ma misurabile.

La densità spettrale la si potrebbe ottenere scrivendo la distribuzione spettrale della corrente, abbiamo che la corrente che passa in un intervallo di tempo T_m sarà data da:

$$I_{T_m}(t) = \sum_{i=1}^N F(t - t_i). \quad (1.2.47)$$

Dove $F(t)$ è una certa funzione che descrive il passaggio temporale del singolo elettrone, ce la possiamo immaginare come una curva piccata in un certo istante temporale. In particolare questa funzione avrà la proprietà:

$$\int_{-\tau_c/2}^{\tau_c/2} F(t) dt = e. \quad (1.2.48)$$

Dove τ_c è il tempo di correlazione del passaggio del singolo elettrone (la durata del pacchetto).

La funzione di correlazione si calcolerà così:

$$\overline{\langle I_T(t) I_T(t + \tau) \rangle} = \sum_{i=1}^{\langle n \rangle} \overline{F(t) F(t + \tau)}. \quad (1.2.49)$$

Tipicamente i tempi di correlazione del passaggio dell'elettrone sono molto piccoli, quindi ci aspettiamo che lo spettro $G(f)$ sia quasi bianco (la frequenza "di taglio" è lontana), nelle dispense di Arimondo troviamo il conto per una determinata funzione $F(t)$, il risultato di questo conto è:

$$G(f) = 2e \langle I \rangle. \quad (1.2.50)$$

Se confrontiamo questa densità spettrale con quella del rumore Johnson notiamo che il rumore shot domina quando il voltaggio medio è:

$$\langle V \rangle > \frac{2k_B T}{e}. \quad (1.2.51)$$

A temperatura ambiente di ha che per prevalere il rumore shot è necessario $\langle V \rangle > 50 \text{ mV}$. Questo sembra strano perché il rumore shot ci si aspetta che sia dominante per basse correnti, quindi bassi voltaggi. Tuttavia dobbiamo stare attenti al fatto che le correnti sono comunque vincolate, nonostante il voltaggio dia alto: la nostra trattazione vale solo per correnti piccole.

1.2.5 Introduzione ai solidi.

I solidi sono in genere sistemi molto complicati: nuclei, elettroni interagiscono tra di loro. In linea di principio possiamo scrivere una Hamiltoniana e trovare le sue Autofunzioni.

$$H\psi = E\psi. \quad (1.2.52)$$

Tale Hamiltoniana ha tantissimi contributi:

$$H = T_e + T_N + V_{N-N} + V_{N-e} + V_{e-e} + C_e^{\text{rel}}. \quad (1.2.53)$$

Dove abbiamo:

Termine cinetico per gli elettroni

$$T_e = \sum_e \frac{p_e^2}{2m} = - \sum_e \frac{\hbar^2 \nabla_i^2}{2m}. \quad (1.2.54)$$

Termine cinetico per i nuclei

$$T_N = - \sum_I \frac{\hbar^2 \nabla_{R_I}^2}{2M}. \quad (1.2.55)$$

Termine di interazione Nucleo-Nucleo

$$V_{N-N} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{Z_i Z_j e^2}{|R_i - R_j|}. \quad (1.2.56)$$

Termine di interazione Nucleo-Nucleo

$$V_{e-e} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|}. \quad (1.2.57)$$

Termine di interazione Nucleo-Nucleo

$$V_{N-e} = \frac{1}{2} \sum_{i,I} \frac{Z_i e^2}{|r_i - R_I|}. \quad (1.2.58)$$

Correzioni relativistiche per gli elettroni

$$C_e^{\text{rel}} = \sum_e \left[\underbrace{-\frac{p_e^4}{2m^3 c^2}}_{\text{Correzione al primo ordine su } T_e} + \underbrace{\frac{\hbar^2 \nabla_e^2 V_e}{8m^2 c^2}}_{\text{L'elettrone vede un potenziale medio esteso su una certa dim.}} + \underbrace{\frac{\hbar}{4m^2 c^2} (\nabla \mathbf{v}_e \wedge \mathbf{p}_e) \boldsymbol{\sigma}_e}_{\text{Termine Spin-Orbita}} \right]. \quad (1.2.59)$$

Il termine spin orbita deriva dal fatto che un elettrone che si muove all'interno di un campo elettrico vede nel suo sistema di riferimento un campo magnetico:

$$\mathbf{B} = -\frac{\mathbf{v} \wedge \mathbf{E}}{c}. \quad (1.2.60)$$

l'elettrone ha un momento magnetico:

$$\boldsymbol{\mu} = -\frac{e\hbar}{2mc} \boldsymbol{\sigma}_e. \quad (1.2.61)$$

Quindi esce fuori il termine:

$$- \mathbf{B} \boldsymbol{\mu} = \frac{\hbar^2}{2m^2 c^2} (\nabla \mathbf{v}_e \wedge \mathbf{p}_e) \boldsymbol{\sigma}_e. \quad (1.2.62)$$

Risolvere una Hamiltoniana del genere in modo esplicito è un grosso casino viste le dipendenze di ognuno dei termini precedenti:

$$H(\{\mathbf{r}\}, \{\mathbf{R}\}) = E\psi(\{\mathbf{r}\}, \{\mathbf{R}\}). \quad (1.2.63)$$

Per risolvere questo problema facciamo l'approssimazione adiabatica o di Born-Oppenheimer che consiste nel supporre il moto dei nuclei molto più lento di quello degli elettroni.

Si cerca di risolvere il moto degli elettroni assumendo i nuclei praticamente fermi.

A tale scopo si scrive la funzione d'onda nel seguente modo:

$$\psi(\{\mathbf{r}\}, \{\mathbf{R}\}) = \underbrace{F(\{\mathbf{R}\})}_{\text{Moto nuclei}} \underbrace{\varphi(\{\mathbf{r}\}, \{\mathbf{R}\})}_{\text{Moto elettroni}}. \quad (1.2.64)$$

Sostituendo questa nella Hamiltoniana i termini riguardanti gli elettroni restano invariati, il termine cinetico nucleare invece cambia nel laplaciano:

$$\begin{aligned} \nabla_R^2 \psi \rightarrow & \varphi(\{\mathbf{r}\}, \{\mathbf{R}\}) \nabla_R^2 F(\{\mathbf{R}\}) + \\ & \frac{2 \nabla_R F(\{\mathbf{R}\}) \nabla_R \varphi(\{\mathbf{r}\}, \{\mathbf{R}\})}{F(\{\mathbf{R}\}) \nabla_R^2 \varphi(\{\mathbf{r}\}, \{\mathbf{R}\})} + \end{aligned} \quad (1.2.65)$$

L'approssimazione consiste nel trascurare i termini in cui vi è la derivata rispetto a \mathbf{R} di φ . Questo significa considerare nella φ le coordinate dei nuclei fissati.

L'equazione di Shrodinger diventa:

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{2m} F(\mathbf{r}) \nabla_r^2 \varphi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) + \\ & + (V_{ee} + V_{eN} + C_e^{\text{rel}}) F(\mathbf{R}) \varphi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) + \\ & -\frac{\hbar^2}{2M} \varphi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \nabla_R^2 F(\mathbf{R}) + \\ & + V_{NN} F(\mathbf{R}) \varphi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \\ & = EF(\mathbf{R}) \varphi(\mathbf{r}, \mathbf{R}). \end{aligned} \quad (1.2.66)$$

Cerchiamo di renderla separabile: dividiamo per la funzione d'onda stessa. Abbattendo ulteriormente la notazione possiamo scrivere:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla_r^2 \varphi}{\varphi} + V_{ee} + V_{eN} + C_e^{\text{rel}} - \frac{\hbar^2}{2M} \frac{\nabla_R^2 F}{F} = E. \quad (1.2.67)$$

A questo punto l'ultimo termine prima dell'uguale è solo una costante per gli elettroni, non contribuirà alla distribuzione dei livelli energetici se non come un offset, quindi abbiamo che possiamo risolvere per le energie dei livelli elettronici nel potenziale dei nuclei $E_n(\mathbf{R})$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla_r^2 \varphi(\mathbf{r}, \mathbf{R})}{\varphi(\mathbf{r}, \mathbf{R})} + V_{eN} + V_{ee} + C_e^{\text{rel}} = E_n(\mathbf{R}). \quad (1.2.68)$$

Oppure possiamo riscriverla meglio come:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_r^2 \varphi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) + (V_{eN} + V_{ee} + C_e^{\text{rel}}) \varphi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = E_n(\mathbf{R}) \varphi(\mathbf{r}, \mathbf{R}). \quad (1.2.69)$$

Trovate le soluzioni per gli elettroni possiamo sostituire per la parte di equazione che risolveva i nuclei:

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_R^2 F(\mathbf{R}) + [V_{NN} + E_n(\mathbf{R})] F(\mathbf{R}) = EF(\mathbf{R}). \quad (1.2.70)$$

Senza il funzionale E_n il cristallo non starebbe insieme: tutti gli altri termini in equazione sono repulsivi.

Risolvere l'equazione per gli elettroni è molto complicato, dobbiamo semplificare ancora per ricavarne qualche informazione: scriviamo la funzione d'onda per gli N elettroni come un prodotto di funzioni d'onda a singolo elettrone (deve essere un prodotto antisimmetrico perché sono fermioni):

$$\varphi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \frac{1}{\sqrt{n}} \begin{vmatrix} \varphi_1(r_1) & \cdots & \varphi_1(r_n) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_n(r_1) & \cdots & \varphi_n(r_n) \end{vmatrix}. \quad (1.2.71)$$

Il determinante nella precedente equazione si chiama determinante di Slater. Sostituendo questa troveremo una Hamiltoniana a singola particella:

$$H_F(r_i) \varphi_i(r_i) = E_i \varphi_i(r_i). \quad (1.2.72)$$

Capitolo 2

Solidi

2.1 Lezione 16

25-03-2020

Utilizzando l'approssimazione di Born-Oppenheimer ci siamo persi le interazioni tra gli elettroni ed i modi di vibrazione de cristallo, ovvero i fononi¹.

Abbiamo iniziato a cercare soluzioni indipendenti, quindi abbiamo spezzato la funzione d'onda dipendente dalle variabili degli n elettroni nel prodotto di n funzioni d'onda dipendenti ognuna dalle variabili del proprio elettrone. Per far questo abbiamo trovato la formula con il determinante di Slater. Prendiamo il prodotto antisimmetrizzato così ottenuto e lo inseriamo nella Hamiltoniana, proiettiamo inoltre su una singola ψ :

$$H_{HF}(\mathbf{r}_i)\psi_i(\mathbf{r}_i) = E_i\psi_i(\mathbf{r}_i). \quad (2.1.1)$$

Esplicitando l'Hamiltoniana si ha:

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_i(\mathbf{r}) - \underbrace{\sum_I \frac{Z_I e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_I|}\psi_i(\mathbf{r})}_{\text{Interazione con nuclei}} + \underbrace{\left[\sum_{j \neq i} e^2 \int \frac{\psi_j^*(\mathbf{r}')\psi_j(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' \right]}_{\text{Repulsione Coulombiana}} \psi_i(\mathbf{r}) + \\ & - \underbrace{\left[\sum_j e^2 \left(\int \frac{\psi_j^*(\mathbf{r}')\psi_j(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' \right) \psi_j(\mathbf{r}) \right]}_{\text{Termine di scambio}} = E_i\psi_i(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (2.1.2)$$

Il termine di scambio viene fuori dall'aver antisimmetrizzato la funzione d'onda.

Vediamo adesso come trattare i vari termini della equazione. Per il termine Coulombiano è semplice, possiamo trattarlo come una densità di elettroni dicendo che:

$$\sum_{i=1}^n |\psi_i(\mathbf{r})|^2 = n(\mathbf{r}). \quad (2.1.3)$$

In questo modo il contributo alla Hamiltoniana diventa:

$$\int \frac{e^2 n(\mathbf{r})}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}. \quad (2.1.4)$$

tuttavia non conosciamo la densità degli elettroni in generale, una buona approssimazione consiste nel partire dalla somma delle densità degli elettroni prendendo come funzioni d'onda gli orbitali atomici. In questo modo troveremo un potenziale $U(\mathbf{r})$ da inserire nella Hamiltoniana.

Per trattare il termine di scambio solitamente si utilizza un metodo detto Local Density: prendere la media sulle funzioni d'onda di $U(\mathbf{r})$ e per calcolarlo utilizzare come funzioni d'onda quelle gli elettroni liberi (onde piane). Senza trattare questo metodo diciamo soltanto che alla fine del procedimento si arriva ad un problema Hamiltoniano di singola particella:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U_c(\mathbf{r}). \quad (2.1.5)$$

Dove $U_c(\mathbf{r})$ è un potenziale che viene fuori dai vari termini introdotti sopra.

La soluzione che si ottiene con questo metodo è una soluzione ad elettroni indipendenti: ci sarà comunque un termine di interazione elettrone-elettrone ma non saremo in grado di trovare le correlazioni tra gli elettroni.

¹Questa interazione la vedrà chi affronterà stato solido.

2.1.1 Reticoli nei solidi

supponiamo adesso che gli ioni del solido siano disposti in modo ordinato: celle che si ripetono nello spazio. Questo indica che $U_c(\mathbf{r})$ è periodico.

Visto che il cristallo ha una struttura di questo tipo possiamo descriverlo con un reticolo: un insieme di vettori \mathbf{R} che definiscono nello spazio le posizioni di ciascuno ione. In 3 dimensioni possiamo scrivere tale vettore come:

$$\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3. \quad (2.1.6)$$

Dove gli n_i sono numeri interi mentre gli \mathbf{a}_i sono detti vettori primari, questi ultimi ci identificano la cella unitaria del reticolo. La cella in Figura 2.1 sottesa ai vettori primari è detta cella unitaria. La scelta della

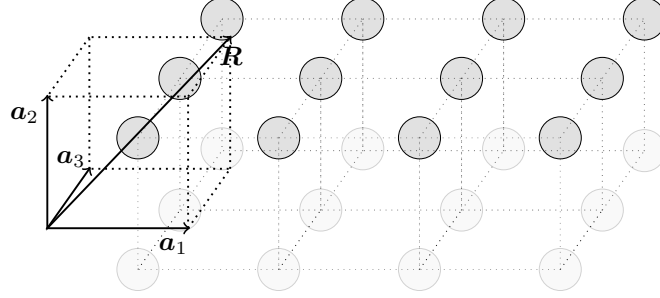


Figura 2.1: Esempio di reticolo

cella unitaria per il reticolo è arbitraria, l'unico criterio da rispettare è che sia effettivamente la più piccola per preservare la periodicità. Infatti avremmo potuto tranquillamente prendere i vertici del reticolo coincidenti con gli atomi come in 2.2. Un altro esempio potrebbe essere quello della grafite, questa ha una struttura esagonale,

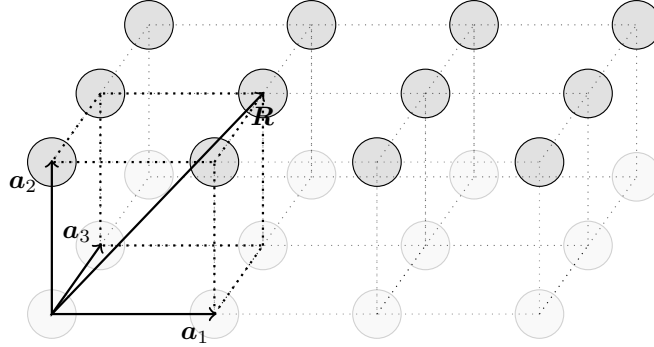


Figura 2.2: Reticolo alternativo

il più piccolo reticolo che si può fare per preservare la periodicità in questo caso è composto da due atomi.

Definizione 1.1: Reticolo di Bravais

Insieme di vettori che descrivono la struttura periodica del cristallo.

Per descrivere il cristallo possiamo introdurre un ulteriore reticolo: \mathbf{K} . Questo è l'insieme dei vettori che soddisfano

$$e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}} = 1. \quad (2.1.7)$$

Anche questi vettori \mathbf{K} formano un reticolo di Bravais, questo è detto *Reticolo reciproco*:

$$\mathbf{K} = m_1 \mathbf{b}_1 + m_2 \mathbf{b}_2 + m_3 \mathbf{b}_3. \quad (2.1.8)$$

Soddisfare la relazione 2.1.7 implica che deve esser vera anche la seguente:

$$\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi \delta_{ij}. \quad (2.1.9)$$

Esempio: reticolo cubico

Nel caso di reticolo cubico abbiamo che la relazione sopra si scrive come:

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_1 &= a\hat{x} & \mathbf{b}_1 &= \frac{2\pi}{a}\hat{x} \\ \mathbf{a}_2 &= a\hat{y} & \mathbf{b}_2 &= \frac{2\pi}{a}\hat{y} \\ \mathbf{a}_3 &= a\hat{z} & \mathbf{b}_3 &= \frac{2\pi}{a}\hat{z}. \end{aligned} \quad (2.1.10)$$

Il reticolo reciproco è quindi anche esso cubico, non è scontato in generale che tale reticolo assuma la stessa forma del reticolo diretto.

In genere si usa una particolare cella chiamata Zona di Brilloiun.

2.1.2 Prima zona di Brilloiun

Dato il reticolo reciproco prendiamo tutti i vettori \mathbf{K} e se ne costruiscono le rette che bisecano tali vettori, l'area generata dalle bisecanti è la prima zona di Brilloiun. Vediamo che forma ha nel caso di un reticolo quadrato bidimensionale in Figura 2.3 Questo metodo e la cella che ne deriva hanno un nome famoso: *cella primitiva di*

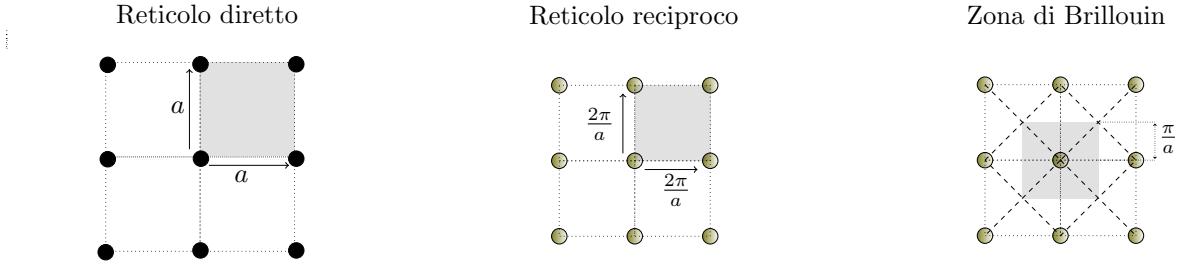


Figura 2.3: Zona di Brilloiun per reticolo quadrato bidimensionale partendo dal reticolo diretto.

Wiegner-Seitz. Quindi nel reticolo reciproco la cella di Wiegner-Seitz è detta anche prima zona di Brilloiun. I vettori del reticolo reciproco assumono un ruolo molto importante nella descrizione degli stati elettronici, hanno inoltre una connessione diretta con gli esperimenti che possiamo fare per studiare la struttura del cristallo.

2.1.3 Osservazione della struttura periodica del cristallo

Per osservare la struttura periodica del materiale ad inizio secolo vennero fatti esperimenti con i raggi X, per schematizzare questi esperimenti di diffrazione prendiamo un solido avente un atomo per cella, la distanza tra gli atomi è a come in Figura 2.4. Su questo reticolo mandiamo un'onda elettromagnetica che viene scatterata dal cristallo interagendo con gli atomi. Cerchiamo l'interferenza costruttiva della radiazione dopo il passaggio

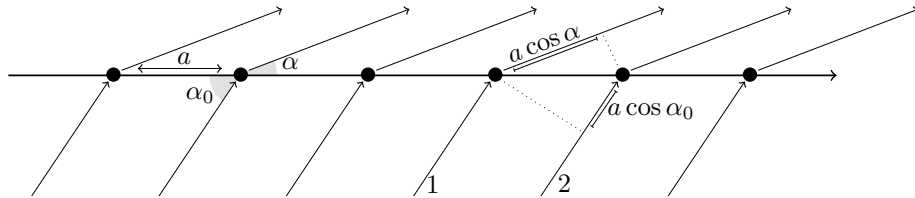


Figura 2.4: Esperimento per l'osservazione della struttura periodica dei cristalli

attraverso il cristallo. Dallo schema di Figura 2.4 abbiamo è evidente la differenza di cammino ottico tra i raggi 1 e 2, inoltre per avere interferenza costruttiva questa differenza dovrà essere un multiplo intero della lunghezza d'onda:

$$a (\cos \alpha - \cos \alpha_0) = l\lambda. \quad (2.1.11)$$

Per descrivere il processo di diffrazione assumiamo che lo scattering sia elastico, chiamando q_0 e q i vettori d'onda delle radiazioni incidenti e diffusa abbiamo che:

$$|q| = |q_0| = \frac{2\pi}{\lambda}. \quad (2.1.12)$$

Quest'ultima assunzione è ragionevole, infatti se mando un'onda con energia $\hbar\omega$ ² avrò anche che:

$$\hbar\omega = \frac{2\pi}{\lambda} c\hbar. \quad (2.1.13)$$

Questa è la massima energia che possiamo cedere al cristallo, considerare lo scattering elastico significa assumere che:

$$\Delta E \ll \hbar\omega. \quad (2.1.14)$$

Ma l'impulso guadagnato dal cristallo può essere al massimo due volte l'impulso della radiazione incidente, tuttavia l'energia cinetica del cristallo è

$$K = \frac{P^2}{2M}. \quad (2.1.15)$$

La variazione di energia sarà data dalla conservazione dell'impulso:

$$\Delta E = \frac{(2\pi\hbar/\lambda)^2}{2M}. \quad (2.1.16)$$

Dalla relazione 2.1.13 e dalla 2.1.14 abbiamo quindi che deve essere rispettata:

$$c \frac{2\pi}{\lambda} \hbar \gg \frac{(2\pi\hbar/\lambda)^2}{2M} \implies 2cM \gg \frac{2\pi}{\lambda} \hbar. \quad (2.1.17)$$

Considerando che la distanza reticolare è approssimativamente dell'ordine di 10^{-10} m (quindi anche λ è di quell'ordine) e che possiamo avere per questo esperimento cristalli di massa 10 g la disuguaglianza è rispettata: ha senso considerare lo scattering elastico.

Utilizzando la notazione in cui il versore entrante è \hat{s}_0 mentre il versore uscente è \hat{s} si ha:

$$\begin{aligned} \mathbf{q} &= |\mathbf{q}| \hat{s} \\ \mathbf{q}_0 &= |\mathbf{q}_0| \hat{s}_0. \end{aligned} \quad (2.1.18)$$

La condizione per avere interferenza costruttiva diventa allora:

$$\mathbf{a} \cdot |\hat{s} - \hat{s}_0| = l\lambda. \quad (2.1.19)$$

Ma la differenza tra i versori è data da:

$$\begin{aligned} \hat{s} - \hat{s}_0 &= \frac{\mathbf{q} - \mathbf{q}_0}{|\mathbf{q}|} = \\ &= \frac{\lambda}{2\pi} \Delta \mathbf{q}. \end{aligned} \quad (2.1.20)$$

Quindi la condizione per avere interferenza costruttiva è:

$$\mathbf{a} \cdot |\Delta \mathbf{q}| = 2\pi l. \quad (2.1.21)$$

Dove l è un intero. In 3 dimensioni avremmo quindi:

$$\begin{aligned} \mathbf{a} \cdot |\Delta \mathbf{q}| &= 2\pi l_1 \\ \mathbf{b} \cdot |\Delta \mathbf{q}| &= 2\pi l_2 \\ \mathbf{c} \cdot |\Delta \mathbf{q}| &= 2\pi l_3. \end{aligned} \quad (2.1.22)$$

Queste relazioni ci dicono che abbiamo una interferenza costruttiva quando $\Delta \mathbf{q}$ appartiene al reticolo reciproco, quindi vedremo una figura di interferenza della forma del reticolo reciproco (come in Figura 2.5)

$$\Delta \mathbf{q} = \mathbf{K}. \quad (2.1.23)$$

Una volta ottenuta una misura del reticolo reciproco possiamo risalire al reticolo diretto facendo il reciproco del reciproco.

2.1.4 Teorema di Bloch

Dalle definizioni date nei paragrafi precedenti possiamo scrivere le proprietà di periodicità del potenziale U_c come:

$$U_c(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = U_c(\mathbf{r}). \quad (2.1.24)$$

Le autofunzioni di un potenziale periodico le possiamo trovare con il teorema di Bloch.

²tale onda sarà nei raggi X, è necessario avere $a \sim \lambda$ per poter fare uno scattering di questo tipo

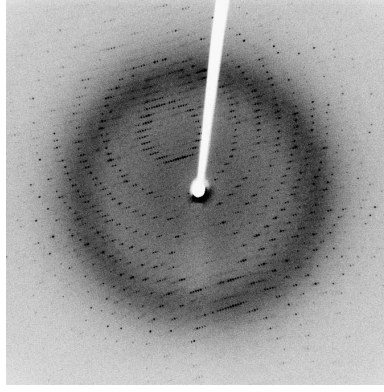


Figura 2.5: Spettro di diffrazione da un cristallo di proteina.

Fatto 1.1: Teorema di Bloch

Le autofunzioni di un potenziale periodico le possiamo identificare con il prodotto di un'onda piana moltiplicata per una funzione periodica $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ avente lo stesso periodo del reticolo.

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (2.1.25)$$

Dove \mathbf{k} è l'autovalore, diverso dal vettore \mathbf{K} del reticolo reciproco.

Operatore di traslazione

Un altro modo di esprimere il teorema è quello di dire che:

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (2.1.26)$$

Dove ovviamente \mathbf{R} è sempre un vettore del reticolo diretto. Da quest'ultima proprietà di traslazione se ne deduce che le autofunzioni del teorema di Bloch sono anche autostati delle traslazioni $T_{\mathbf{R}}$:

$$T_{\mathbf{R}}f(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r} + \mathbf{R}). \quad (2.1.27)$$

Una regola di composizione per questo operatore è la seguente:

$$T_{\mathbf{R}}T_{\mathbf{R}'} = T_{\mathbf{R}+\mathbf{R}'}. \quad (2.1.28)$$

Tale operatore commuta con l'Hamiltoniana essendo questa periodica:

$$\begin{aligned} T_{\mathbf{R}}H\psi &= H(\mathbf{r} + \mathbf{R})\psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = \\ &= H(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = \\ &= HT_{\mathbf{R}}\psi(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (2.1.29)$$

Inoltre gli operatori di traslazione commutano anche tra di loro:

$$T_{\mathbf{R}}T_{\mathbf{R}'}\psi(\mathbf{r}) = T_{\mathbf{R}'}T_{\mathbf{R}}\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} + \mathbf{R} + \mathbf{R}'). \quad (2.1.30)$$

Quindi tutti gli autostati della Hamiltoniana li posso scrivere anche come autostati delle traslazioni. Il teorema di Bloch deriva proprio dall'aver scelto come autostati della Hamiltoniana quelli dell'operatore di traslazione.

Dimostrazione del teorema di Bloch

Prendiamo una ψ che sia autostato delle traslazioni:

$$T_{\mathbf{R}}\psi = c(\mathbf{R})\psi. \quad (2.1.31)$$

Applichiamo a questa un altro operatore di traslazione:

$$\begin{aligned} T_{\mathbf{R}'}T_{\mathbf{R}}\psi &= c(\mathbf{R})T_{\mathbf{R}'}\psi = \\ &= c(\mathbf{R})c(\mathbf{R}')\psi. \end{aligned} \quad (2.1.32)$$

Per le proprietà dell'operatore di traslazione si ha anche che:

$$T_{\mathbf{R}+\mathbf{R}'} = c(\mathbf{R} + \mathbf{R}')\psi. \quad (2.1.33)$$

Quindi abbiamo una condizione sugli autovalori delle traslazioni:

$$c(\mathbf{R} + \mathbf{R}') = c(\mathbf{R})c(\mathbf{R}'). \quad (2.1.34)$$

Per i vettori primari che generano il reticolo possiamo sempre scrivere gli autovalori di traslazione come ³:

$$c(\mathbf{a}_i) = e^{2\pi i x_i}. \quad (2.1.35)$$

Dove x_i è in generale un numero complesso.

Preso un generico vettore del reticolo:

$$\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3. \quad (2.1.36)$$

L'autovalore associato a questa traslazione sarà:

$$c(\mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} = c(\mathbf{a}_1)^{n_1} c(\mathbf{a}_2)^{n_2} c(\mathbf{a}_3)^{n_3}. \quad (2.1.37)$$

Dove \mathbf{k} è un vettore del tipo:

$$\mathbf{k} = x_1 \mathbf{b}_1 + x_2 \mathbf{b}_2 + x_3 \mathbf{b}_3. \quad (2.1.38)$$

I \mathbf{b}_i sono gli stessi del reticolo reciproco:

$$\mathbf{b}_i \mathbf{a}_j = 2\pi \delta_{ij}. \quad (2.1.39)$$

Gli autovalori del nostro operatore di traslazione gli possiamo quindi scrivere come:

$$T_{\mathbf{R}}\psi = c(\mathbf{R})\psi = e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}}\psi(\mathbf{r}). \quad (2.1.40)$$

Questa è la forma del teorema di Bloch, dobbiamo dimostrare che i \mathbf{k} sono vettori reali, non vettori complessi generici. Per far questo dobbiamo introdurre delle condizioni al contorno sugli autostati: scegliamo le condizioni al contorno di Born Von Kauman.

Definizione 1.2: Condizioni al contorno di Born Von Kauman

Condizioni periodiche sugli autostati:

$$\psi(\mathbf{r} + N_i \mathbf{a}_i) = \psi(\mathbf{r}). \quad (2.1.41)$$

Dove N_i è il numero di celle nella direzione i-esima.

Inserendo tale condizione al contorno nella 2.1.40 otteniamo che:

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + N_i \mathbf{a}_i) = \underbrace{e^{iN_i \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i}}_{=1 \text{ Per BVK}} \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (2.1.42)$$

Di conseguenza abbiamo che

$$e^{iN_i \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i} = 1. \quad (2.1.43)$$

Questo comporta che gli x_i del vettore \mathbf{k} sono vincolati ad essere numeri reali del tipo:

$$x_i = \frac{m_i}{N_i}. \quad (2.1.44)$$

Con m_i interi. Possiamo anche riscrivere tale vettore \mathbf{k} come:

$$\mathbf{k} = \sum_{i=1}^3 \frac{m_i}{N_i} \mathbf{b}_i. \quad (2.1.45)$$

Ed il teorema di Bloch è così dimostrato.

Abbiamo inoltre il risultato che i vettori \mathbf{k} gli possiamo descrivere all'interno dello spazio \mathbf{K} del reticolo reciproco. Ad esempio considerando il caso di reticolo cubico si ha che, essendo m_i interi e N uguale per tutti i lati del reticolo diretto, dentro ad una cella unitaria del reticolo reciproco vi staranno N vettori \mathbf{k} per ognuna delle 3 direzioni. Tale situazione è rappresentata in Figura 2.6 (o meglio, c'è un disperato tentativo di rappresentazione)

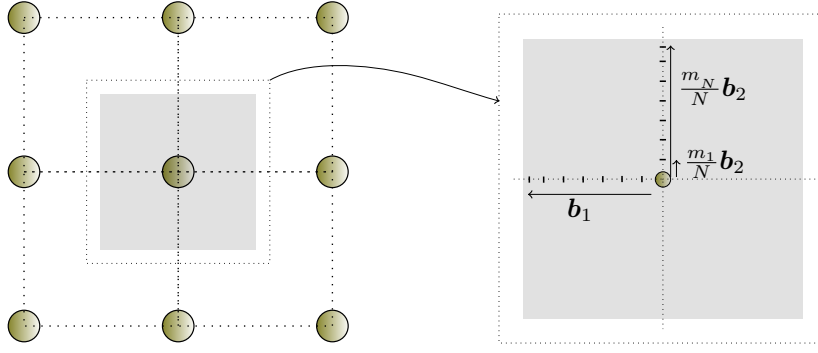


Figura 2.6: Vettori \mathbf{k} nello spazio del reticolo reciproco \mathbf{K}

partendo dal reticolo di Brilloiun. In conclusione \mathbf{k} è l'autovalore delle traslazioni e ci identifica gli autostati di Bloch nel potenziale periodico, da non confondere con i \mathbf{K} che sono i vettori del reticolo reciproco. Avendo scritto la funzione d'onda come

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u(\mathbf{r}). \quad (2.1.46)$$

Si ha che un caso particolare di questo tipo di funzioni d'onda è l'onda piana:

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}. \quad (2.1.47)$$

Per questo caso, che è quello di particella libera, la periodicità della $u(\mathbf{r})$ è completa: per qualunque vettore \mathbf{R} dello spazio "reale" abbiamo una ψ periodica.

Questo ci fa capire che nel caso generale (quello con $u(\mathbf{r})$) ho una invarianza traslazionale (come nel caso di particelle libere) che è ridotta dalla presenza del solido che con il suo reticolo periodico influenza la funzione d'onda con il termine $u(\mathbf{r})$.

Siamo allora tentati di identificare il \mathbf{k} che compare nella 2.1.46 come il vettore d'onda dell'elettrone all'interno del solido ⁴.

Tuttavia non abbiamo più la completa invarianza traslazionale, quindi le funzioni d'onda di Bloch non sono autostati dell'impulso:

$$\begin{aligned} \mathbf{P} &= \frac{\hbar \nabla}{i} \psi_{n\mathbf{k}} = \\ &= \hbar \mathbf{k} \psi_{n\mathbf{k}} + \underbrace{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \nabla u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})}_{\text{Pezzo di troppo}}. \end{aligned} \quad (2.1.48)$$

In approssimazione semi-classica (scrivendo una equazione dinamica per l'elettrone) è possibile utilizzare $\hbar \mathbf{k}$ come se fosse ancora collegato con l'impulso dell'elettrone, ad esempio in risposta ad un campo elettrico esterno si può trattare introducendo una accelerazione $\hbar \dot{\mathbf{k}}$. In questo modo si può ancora trattare questo come impulso, soltanto che quest'ultimo sarà definito a meno di un vettore \mathbf{K} del reticolo reciproco...

La conservazione dell'impulso a meno di un vettore del reticolo reciproco ha un significato interessante nella descrizione degli autostati per il nostro potenziale periodico:

$$\psi_{n\mathbf{k}} = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (2.1.49)$$

Possiamo chiederci se il modo di scrivere questo autostato sia unico, proviamo a fare il seguente cambio di variabile:

$$\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}' + \mathbf{K}. \quad (2.1.50)$$

Questo equivale a supporre che il mio \mathbf{k} sia fuori dalla cella unitaria (assumendo ovviamente che \mathbf{k}' sia all'interno del reticolo reciproco invece). In questo modo l'autofunzione ψ diventa:

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}} \underbrace{e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})}_{\substack{\text{Periodico con} \\ \text{la periodicità} \\ \text{del reticolo}}}. \quad (2.1.51)$$

Il secondo pezzo può essere infatti riscritto come:

$$e^{i\mathbf{K}\cdot(\mathbf{r}+\mathbf{R})} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} \underbrace{e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}}}_{=1} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (2.1.52)$$

³È una scrittura generale, possiamo scriverli in questo modo una volta normalizzati

⁴Non ci dobbiamo scordare che abbiamo trovato le autofunzioni dell'operatore di traslazione, sono le stesse della Hamiltoniana che descriveva il moto di un elettrone all'interno del solido!

Inglobando la fase nella funzione periodica possiamo riscrivere:

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}'}(\mathbf{r}). \quad (2.1.53)$$

Abbiamo allora una ridondanza nella individuazione del \mathbf{k} : la stessa ψ può essere scritta come $\psi_{n\mathbf{k}}$ oppure come $\psi_{n\mathbf{k}'}$, ovvero con due onde piane diverse a moltiplicare la funzione periodica.

La cosa da ricordare è che questi vettori d'onda che sono la causa della ambiguità non sono scorrelati: sono legati per definizione da un \mathbf{K} del reticolo reciproco come nella 2.1.50.

Possiamo fare allora una cosa furba: possiamo descrivere tutti gli stati elettronici all'interno di una cella unitaria del reticolo reciproco, se sono fuori da tale cella basta traslare lo stato dentro a quest'ultima sfruttando l'ambiguità presente sui \mathbf{k} .

Tipicamente si descrivono gli autostati degli elettroni in un cristallo limitando i \mathbf{k} delle autofunzioni di Bloch a stare dentro la prima zona di Brillouin. I livelli energetici dipendono da \mathbf{k} , ad esempio nel caso di elettroni liberi si ha:

$$\mathcal{E}_{n\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 |\mathbf{k}|^2}{2m}. \quad (2.1.54)$$

Plottando questi livelli ottengo delle parabole come in Figura

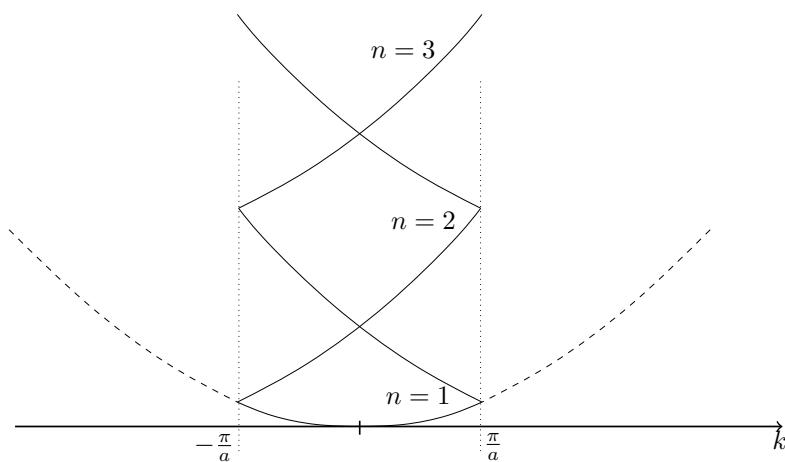


Figura 2.7: Livelli energetici di una particella libera in un potenziale periodico