



Università
di Catania

Dipartimento
di Fisica
e Astronomia
"Ettore Majorana"



CORSO DI LAUREA IN FISICA

MESOSCOPIC AND TOPOLOGICAL MATERIALS

CORSO TENUTO DAL PROF. PELLEGRINO NELL'A.A. 2024/2025

Indice

Prefazione	1
CAPITOLO 0 Introduzione	3
CAPITOLO 1 Teoria semiclassica	5
1.1 Equazione semiclassica di Boltzmann	5
1.2 Osservabili	11
1.3 Approssimazione di tempo di rilassamento	12
1.4 Scattering elastico e regime diffusivo	14
Bibliografia	15

Prefazione

Introduzione

Ciao

CAPITOLO

0

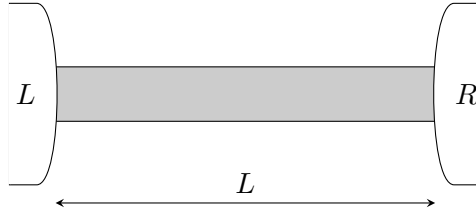
Teoria semiclassica

CAPITOLO

1

1.1 Equazione semiclassica di Boltzmann

Nello studio di una qualsiasi nanostruttura, è necessario mettere a contatto questa struttura con i dispositivi di misura macroscopici. Tipicamente, ciò viene fatto strutturando elettrodi molto più grandi dei sistemi studiati e mettendoli in contatto con questi ultimi. Un tale elettrodo funge da serbatoio ideale (sia termico che di particelle) per gli elettroni. Consideriamo quindi un sistema mesoscopico⁽¹⁾ composto da un conduttore (ad esempio un metallo, un semiconduttore o un isolante topologico) in contatto con due serbatoi L ed R , di dimensioni macroscopiche che possono fornire sia cariche (più precisamente elettroni) che energia, come in figura:



Per serbatoio ideale intendiamo che il numero di elettroni al suo interno è talmente elevato che la sua temperatura e il suo potenziale chimico restano invariati anche se un elettrone abbandona o entra nel reservoir, in quanto $N \approx N + 1$ per N grande.

Tale assunzione implica che quando il numero di elettroni del reservoir varia, questo ritorni istantaneamente ad uno stato di equilibrio, rendendo possibile descrivere gli elettroni dei reservoir mediante la distribuzione di Fermi-Dirac:

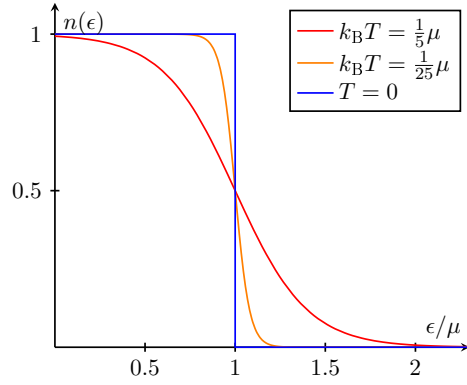
$$f_D(E, \mu, T) = \frac{1}{\exp[(E - \mu)/(k_B T)] + 1} \quad (1.1)$$

Essa rappresenta il numero medio di elettroni ad energia E , fissata la temperatura T e potenziale chimico μ .

Ricordiamo che tale distribuzione segue l'andamento riportato in figura:

1.1	Equazione semiclassica di Boltzmann	5
1.2	Osservabili	11
1.3	Approssimazione di tempo di rilassamento	12
1.4	Scattering elastico e regime diffusivo	14

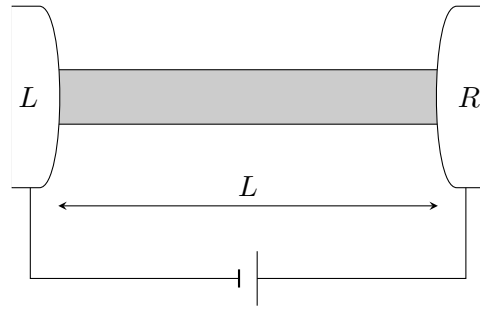
(1) Per mesoscopico si intende un sistema di dimensioni intermedie tra quelle microscopiche e quelle macroscopiche. Possiamo quindi dire più semplicemente che tale sistema ha dimensioni piccole.



DISEGNO PROVVISORIO

Quando $T \rightarrow 0$, essa tende a una funzione a gradino, mentre a temperatura finita ha un andamento più smussato.

In generale, i due serbatoi possono avere temperature T_L e T_R o potenziali chimici μ_L e μ_R diversi. Il modo più semplice per avere, ad esempio, due potenziali chimici diversi è quello di applicare una differenza di potenziale tra i due serbatoi⁽²⁾ collegandoli ad un generatore di tensione, il quale permetterà di modulare μ_L e μ_R :



In conseguenza a tale differenza di potenziale chimico, si verificherà un flusso di elettroni tra i due reservoir, facendo comunque restare questi ultimi in equilibrio per le precedenti assunzioni.

(Di questo paragrafo lascerei solo la prima nota, forse mettendola nella discussione sopra sui serbatoi ideali) Supponiamo che nei due serbatoi il sistema elettronico rimanga in equilibrio anche in presenza di una caduta di tensione o di una differenza di temperatura e, se vi è un flusso di corrente, assumiamo che nei due serbatoi avvenga un rilassamento istantaneo degli elettroni⁽³⁾, i quali rimangono in equilibrio. Ciò significa che gli elettroni nei serbatoi possono essere sempre descritti dalla distribuzione di Fermi-Dirac, la quale rimane invariata⁽⁴⁾.

Studiamo il problema con una teoria semiclassica, dove con tale espressione intendiamo che nell'equazione che descrive il sistema figurano sia termini di tipo classico che altri di tipo quantistico. Più precisamente, descriviamo gli elettroni come particelle classiche e riteniamo la loro posizione e il loro impulso conoscibili contemporaneamente con precisione sufficientemente grande, figurando questi come variabili classiche in alcuni termini, mentre convenientemente come operatori quantistici in altri. Quantitativamente, ciò è ragionevole quando la lunghezza d'onda di Fermi, che rappresenta la larghezza del pacchetto d'onda e quindi l'incertezza sulla posizione della particella data dal principio di

(2) Se invece volessimo realizzare una differenza di temperatura è sufficiente applicare un gradiente termico.

(3) Per rilassamento istantaneo si intende un processo in cui un sistema passa da uno stato di non equilibrio a uno stato di equilibrio in un tempo trascurabilmente breve, praticamente istantaneo rispetto alle scale temporali del fenomeno in esame.

(4) Dubbio mio: ma visto che applichiamo il voltage drop non cambia il potenziale chimico? e quindi la distribuzione di Fermi-Dirac? probabilmente intende che la funzione di distribuzione è sempre una FD, come forma funzionale, ad un opportuno μ

indeterminazione di Heisenberg, data da

$$\lambda_F = \frac{2\pi}{k_F} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2mE_F}},$$

essendo E_F l'energia di Fermi e m la massa efficace dell'elettrone, è molto più piccola di tutte le scale di lunghezza del sistema. Ciò significa che λ_F deve essere molto più piccola delle dimensioni tipiche del sistema e dei diversi liberi cammini medi, cioè delle distanze percorse mediamente da un elettrone tra due eventi consecutivi di scattering della medesima tipologia. In particolare, nella nostra trattazione siamo interessati a tre tipi di liberi cammini medi:

- la lunghezza di scattering elastico ℓ_{el} , associata allo scattering degli elettroni con le impurità del sistema;
- la lunghezza di scattering elettrone-elettrone $\ell_{e,e}$, legata allo scattering di elettroni con altri elettroni e dunque dovuta all'interazione coulombiana;
- la lunghezza di scattering elettrone-fonone $\ell_{e,ph}$, associata allo scattering degli elettroni con i fononi del sistema.

Precisiamo i seguenti fatti:

- lo scattering tra elettroni e impurità è elastico, per cui l'energia dell'elettrone si conserva;
- lo scattering elettrone-elettrone non conserva l'energia del singolo elettrone ma l'energia totale dei due elettroni. Ciò è dovuto al fatto che nello scattering i due elettroni possono scambiare energia, come possiamo vedere nel seguente diagramma:

Mettere disegno diagramma di Feynman

Per quanto detto avremo che, se E_1 ed E_2 sono le energie prima dello scattering e E'_1 ed E'_2 le energie dopo lo scattering, allora avremo che in generale $E_1 \neq E'_1$ e $E_2 \neq E'_2$ ma $E_1 + E_2 = E'_1 + E'_2$;

- nello scattering elettrone-fonone, in cui si ha l'assorbimento o l'emissione di un fonone di energia $\hbar\omega$, l'energia non si conserva, in quanto dopo lo scattering l'elettrone inizialmente avente energia E avrà energia $E \pm \hbar\omega$, come possiamo vedere nei seguenti diagrammi:

Mettere disegno diagramma di Feynman

Un'ulteriore precisione va fatta riguardo all'efficienza dei processi di scattering. Infatti, esiste un'ulteriore lunghezza caratteristica chiamata lunghezza di coerenza $\ell_\phi = v\tau_\phi$, dove v è la velocità di gruppo e τ_ϕ è il tempo che intercorre tra due processi di scattering a seguito dei quali viene modificata la fase della funzione d'onda della particella. Se ℓ_ϕ è piccolo, cioè τ_ϕ è piccolo, diciamo che lo scattering è efficiente e si ha il cosiddetto fenomeno di "dephasing", ossia una randomizzazione della fase della funzione d'onda. In conseguenza a ciò vengono meno tutti i processi coerenti, come i processi di interferenza. Nel momento in cui

vengono meno questi ultimi, la particella, a meno di correzioni di cui terremo conto, si comporta come una particella classica. Questo tipo di descrizione è tipico della fisica dei semiconduttori, ma bisogna prestare attenzione al tipo di processo che si sta studiando: ad esempio, tale approccio non funziona per studiare l'assorbimento inter-banda in cui vogliamo studiare il passaggio di un elettrone dalla banda di valenza alla banda di conduzione, in quanto il concetto di banda non esiste classicamente; al contrario, tale approccio funziona quando studiamo trasporto in corrente continua o modulato debolmente.

Ritornando al nostro sistema mesoscopico collegato ai due serbatoi, ci proponiamo di trovare la funzione di distribuzione degli elettroni in tale sistema.

Cerchiamo quindi una funzione⁽⁵⁾ $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ tale che la quantità

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \frac{d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3},$$

cioè il prodotto tra essa e il volume elementare dello spazio delle fasi, ci dia il numero di elettroni aventi posizione tra \mathbf{r} e $d^3\mathbf{r}$ e impulso tra \mathbf{p} e $d^3\mathbf{p}$. In particolare vale la seguente condizioni di normalizzazione:

$$\int g_s \frac{d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = N, \quad (1.2)$$

dove N è il numero totale di elettroni del nostro sistema mesoscopico e g_s è la degenerazione di spin, che nel caso in esame è semplicemente pari a 2.

Per trovare la funzione di distribuzione ne studiamo l'evoluzione temporale. Dopo un tempo dt , la funzione di distribuzione sarà $f(\mathbf{r} + \mathbf{v} dt, \mathbf{p} + \mathbf{F} dt, t + dt)$, dove \mathbf{v} è la velocità dell'elettrone e \mathbf{F} è la forza che agisce su di esso, generata dal campo elettromagnetico dovuto alla caduta di potenziale. Se non avvengono fenomeni di scattering, per il teorema di Liouville⁽⁶⁾ la funzione di distribuzione rimane costante, ossia

$$f(\mathbf{r} + \mathbf{v} dt, \mathbf{p} + \mathbf{F} dt, t + dt) - f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = 0$$

Se invece avvengono fenomeni di scattering, la funzione di distribuzione varia. Denotata con $I_{\text{coll}}[f] dt$ tale differenza, dove $I_{\text{coll}}[f]$ è detto integrale collisionale e tiene conto di tutti i processi di scattering, abbiamo che

$$f(\mathbf{r} + \mathbf{v} dt, \mathbf{p} + \mathbf{F} dt, t + dt) - f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = I_{\text{coll}}[f] dt \quad (1.3)$$

Il membro destro dell'Equazione (1.3) rappresenta il termine quantistico nell'equazione che descrive il nostro sistema.

Consideriamo il membro di sinistra ed espandiamo al primo in ordine in dt , ottenendo

$$\begin{aligned} & f(\mathbf{r} + \mathbf{v} dt, \mathbf{p} + \mathbf{F} dt, t + dt) - f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \\ &= f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} \cdot \mathbf{v} dt + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} \cdot \mathbf{F} dt + \frac{\partial f}{\partial t} dt - f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) + \mathcal{O}(dt)^2 \\ &\approx \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} \cdot \mathbf{v} dt + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} \cdot \mathbf{F} dt + \frac{\partial f}{\partial t} dt \end{aligned}$$

Utilizzando quanto trovato, otteniamo

$$\frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} \cdot \mathbf{v} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} \cdot \mathbf{F} + \frac{\partial f}{\partial t} = I_{\text{coll}}[f], \quad (1.4)$$

⁽⁵⁾ Notiamo che la validità del concetto di funzione di distribuzione $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ poggia sull'assunzione fatta precedentemente su λ_F e ℓ_ϕ .

⁽⁶⁾ Esso afferma che un volumetto $d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{p}$ dello spazio delle fasi centrato in (\mathbf{r}, \mathbf{p}) evolve nello spazio delle fasi rimanendo invariato. (da sistemare)

che è chiamata equazione di Boltzmann.

Puntualizziamo che in assenza del termine collisionale, l'equazione di Boltzmann prende il nome di equazione di Vlasov:

$$\frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} \cdot \mathbf{v} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} \cdot \mathbf{F} + \frac{\partial f}{\partial t} = 0. \quad (1.5)$$

Osserviamo che tale equazione è applicabile in poche situazioni, in quanto abbiamo supposto che i processi di scattering siano trascurabili ma allo stesso tempo che avvenga il fenomeno di dephasing.

Torniamo adesso all'(1.4). E' utile esprimere la dipendenza da \mathbf{p} tramite le coordinate sferiche, dunque dividendo la dipendenza dalla parte angolare da quella radiale. In tali termini, la funzione di distribuzione sarà nella forma $f(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{p}}, E)$, dove abbiamo messo l'energia al posto del modulo p perché la relazione di dispersione è del tipo

$$\varepsilon(\mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}$$

dove m è la massa efficace dell'elettrone⁽⁷⁾.

In tale forma, il termine contenente la derivata rispetto a \mathbf{p} nell'Eq.(1.4) diventa

$$\frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} \cdot \mathbf{F} = \frac{\partial f}{\partial \hat{\mathbf{p}}} \frac{\partial \hat{\mathbf{p}}}{\partial \mathbf{p}} \cdot \mathbf{F} + \frac{\partial f}{\partial E} \frac{\partial E}{\partial \mathbf{p}} \cdot \mathbf{F}$$

Tuttavia, il primo termine del membro di destra risulta essere trascurabile, vedremo a breve perché.

Possiamo quindi scrivere

$$\frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} \cdot \mathbf{F} = \frac{\partial f}{\partial E} \frac{\partial E}{\partial \mathbf{p}} \cdot \mathbf{F}$$

D'altra parte, il gradiente della relazione di dispersione rispetto all'impulso \mathbf{p} non è altro che la velocità di gruppo \mathbf{v} ,⁽⁸⁾ per cui in definitiva abbiamo che

$$\frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} \cdot \mathbf{F} = \frac{\partial f}{\partial E} \mathbf{v} \cdot \mathbf{F}$$

Supponiamo adesso che la forza sia dovuta soltanto al campo elettrico, dunque sia nella forma $\mathbf{F} = q\mathbf{E}$ dove q è la carica. Allora, ricordando che $\mathbf{E} = -\partial_{\mathbf{r}}\phi$, per quanto detto il termine dell'(1.4) contenente \mathbf{F} diventa

$$\frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} \cdot \mathbf{F} = \frac{\partial f}{\partial E} \mathbf{v} \cdot \left(-q \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{r}} \right) = \frac{\partial f}{\partial E} \left(-q \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{r}} \right) \cdot \mathbf{v}$$

e dunque possiamo riscrivere l'Eq.(1.4) come

$$\frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} \cdot \mathbf{v} + \frac{\partial f}{\partial E} \left(-q \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{r}} \right) \cdot \mathbf{v} + \frac{\partial f}{\partial t} = I_{\text{coll}}[f]$$

ovvero, raggruppando i termini,

$$\left(\frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} - q \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial f}{\partial E} \right) \cdot \mathbf{v} + \frac{\partial f}{\partial t} = I_{\text{coll}}[f] \quad (1.6)$$

Se inglobiamo nell'energia la dipendenza del potenziale dalla posizione, il che corrisponde a dire che f ha una dipendenza del tipo $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, E -$

(7) Infatti stiamo usando implicitamente l'approssimazione di elettroni liberi.

(8) Infatti, esplicitamente si ha

$$\nabla_{\mathbf{p}} \varepsilon(\mathbf{p}) = \nabla_{\mathbf{p}} \frac{\mathbf{p}^2}{2m} = \frac{\mathbf{p}}{m} \equiv \mathbf{v}$$

$q\phi(\mathbf{r})$), il termine tra parentesi della (1.6) diventa proprio $\partial f/\partial \mathbf{r}$, per cui possiamo scrivere più sinteticamente

$$\frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} \cdot \mathbf{v} + \frac{\partial f}{\partial t} = I_{\text{coll}}[f] \quad (1.7)$$

Osserviamo che se $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, E - q\phi(\mathbf{r}))$ si comportasse come una funzione di distribuzione di Fermi-Dirac, ciò significherebbe che nell'Eq.(1.1) al posto di μ dovremmo scrivere $\mu + q\phi(\mathbf{r})$, cioè è come se ci ritrovassimo un potenziale chimico che dipende dalla posizione. Come vedremo, quando f prende la forma di una funzione di Fermi-Dirac efficace, tale μ prenderà il nome di potenziale elettrochimico.

Prima di proseguire, facciamo una stima dell'ordine del termine relativo alla derivata rispetto a $\hat{\mathbf{p}}$ che abbiamo trascurato, in modo da capire quanto è grande l'errore che commettiamo nel trascurarlo. Osserviamo che $\partial f/\partial \hat{\mathbf{p}}$ è adimensionale perché f è una densità di probabilità, dunque possiamo concentrarci sulla parte $\partial \hat{\mathbf{p}}/\partial \mathbf{p} \cdot \mathbf{F}$: nella parte $\partial \hat{\mathbf{p}}/\partial \mathbf{p}$, $\hat{\mathbf{p}}$ non ha dimensioni, mentre \mathbf{p} ha le dimensioni di un impulso ed in particolare è dell'ordine dell'impulso di Fermi p_F ; F invece è una forza elettrica che è dell'ordine della carica moltiplicata per la differenza di tensione applicata divisa la lunghezza del campione. In definitiva abbiamo:

$$\left[\frac{\partial f}{\partial \hat{\mathbf{p}}} \frac{\partial \hat{\mathbf{p}}}{\partial \mathbf{p}} \cdot \mathbf{F} \right] \sim \frac{1}{p_F} \frac{qV}{L}$$

Moltiplicando e dividendo per $\frac{p_F}{m}$ otteniamo

$$\frac{1}{p_F} \frac{qV}{L} = \frac{1}{p_F} \frac{qV}{L} \frac{p_F}{m} \frac{m}{p_F} = qV \frac{m}{p_F^2} \frac{1}{L} \frac{p_F}{m}$$

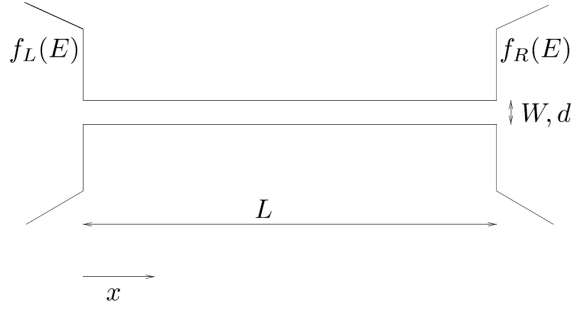
Notiamo che m/p_F^2 è dell'ordine dell'inverso dell'energia di Fermi, ossia $1/E_F$, mentre p_F/m è dell'ordine della velocità di Fermi v_F . In definitiva otteniamo

$$\frac{1}{p_F} \frac{qV}{L} \sim \frac{qV}{E_F} \frac{v_F}{L}$$

Il termine v_F/L rappresenta la scala dell'inverso dei tempi tipici dell'Eq.(1.7), dunque per capire se tale termine è trascurabile dobbiamo guardare l'ordine di grandezza di qV/E_F . In un conduttore, l'energia di Fermi è tipicamente dell'ordine dell'eV o di frazioni dell'eV, mentre qV in genere è dell'ordine dei μeV , dunque tale termine risulta essere dell'ordine di 10^{-6} , per cui è lecito trascurarlo. Precisiamo che omettere tale termine equivale sostanzialmente a trascurare il disturbo nella parte angolare della funzione di distribuzione dovuto a una tensione o ad un gradiente termico.

Esempio 1.1 (Equazione di Boltzmann per un filo ballistico.). Consideriamo un filo quasi-unidimensionale come quello riportato nella figura seguente:⁽⁹⁾

⁽⁹⁾ Disegno da fare il Latex, ora mi secco.



Diciamo che tale sistema è quasi-unidimensionale perché supponiamo che l'ampiezza W del filo sia molto minore della lunghezza L del filo stesso.

Supponiamo che non contenga impurità, sia perfettamente rettangolare e abbia bordi regolari, in modo che risulti $I_{\text{coll}}[f] = 0$. Nel limite statico, in cui $\partial_t f = 0$, l'Eq.(1.4) assumerà allora forma

$$\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{p}}, E) = 0$$

Supponendo che i serbatoi sinistro e destro seguano rispettivamente le distribuzioni di Fermi-Dirac $f_L(E)$ ed $f_R(E)$, la funzione di distribuzione sarà data da:

$$f(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{p}}, E) = \begin{cases} f_L(E) & \text{se } \hat{\mathbf{p}}_x < 0 \\ f_R(E) & \text{se } \hat{\mathbf{p}}_x > 0 \end{cases}$$

Il risultato trovato ci dice che, in assenza di collisioni, i due serbatoi restano indipendenti; inoltre gli elettroni iniettati da sinistra seguono la funzione di distribuzione del serbatoio sinistro anche nel sistema mesoscopico (cioè dentro il cavo) e gli elettroni iniettati da destra nel sistema avranno la funzione di distribuzione del serbatoio destro.⁽¹⁰⁾

1.2 Osservabili

Il motivo per cui siamo interessati a trovare la funzione di distribuzione è che possiamo esprimere le osservabili del sistema in termini di essa. In particolare, la densità spaziale di portatori di carica del sistema sarà data da

$$n(\mathbf{r}) = g_s \int \frac{d^3 \mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t).$$

Risulta immediato verificare che integrando $n(\mathbf{r})$ in tutto il volume spaziale si ottiene il numero di elettroni del sistema. Analogamente, la densità di corrente sarà data da

$$\mathbf{j}_c(\mathbf{r}) = -eg_s \int \frac{d^3 \mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \mathbf{v}(\mathbf{p}) f(\mathbf{r}, \mathbf{p}),$$

dove abbiamo scritto la velocità come $\mathbf{v}(\mathbf{p})$ per sottolineare che essa è data da $\nabla_{\mathbf{p}} \varepsilon(\mathbf{p})$. Passando in coordinate polari possiamo riscrivere tale quantità come

$$\mathbf{j}_c(\mathbf{r}) = -eg_s \int dp p^2 \int \frac{d\hat{\mathbf{p}}}{(2\pi\hbar)^3} \mathbf{v}(\mathbf{p}) f(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{p}})$$

⁽¹⁰⁾ Così come riportato in [Hei13], ciò significa che "Il sistema di elettroni all'interno del filo è quindi composto da elettroni che si muovono verso sinistra e elettroni che si muovono verso destra, che non si mescolano in assenza di diffusione e che sono distribuiti in energia secondo le funzioni di distribuzione nei serbatoi da cui provengono."

dove l'integrazione rispetto a $\hat{\mathbf{p}}$ è esplicitamente data da

$$\int d\hat{\mathbf{p}} = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\vartheta \sin \vartheta$$

Se adesso esprimiamo p^2 come $p^2 = 2mE$, da cui segue che $2p dp = 2m dE$, abbiamo che

$$dp p^2 = \sqrt{2} m^{\frac{3}{2}} \sqrt{E} dE$$

e inoltre possiamo riscrivere \mathbf{j}_c come

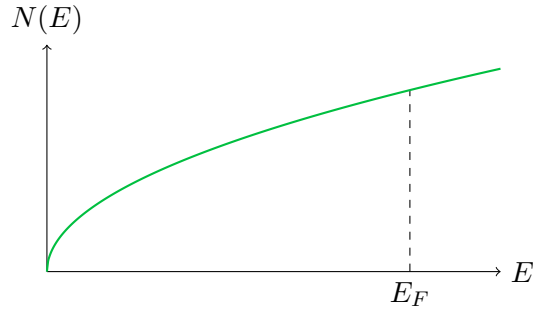
$$\mathbf{j}_c(\mathbf{r}) = -e \int dE N(E) \int \frac{d\hat{\mathbf{p}}}{4\pi} \mathbf{v}(\mathbf{p}) f(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{p}})$$

dove

$$N(E) = \frac{\sqrt{2Em^{\frac{3}{2}}}}{\pi^2 \hbar^3}$$

è la densità degli stati di una particella libera in un sistema tridimensionale.

Graficamente il comportamento di $N(E)$ in funzione dell'energia è il seguente:



Dal grafico si evince che, se operiamo in una finestra di energia attorno all'energia di Fermi spostandoci da essa al massimo di una quantità $\pm kBT$, poiché l'energia di Fermi è dell'ordine della frazione di eV, mentre la temperatura ambiente (cioè circa 300 K) corrisponde a 25 meV, è lecito trattare la densità degli stati come approssimativamente costante.⁽¹¹⁾

1.3 Approssimazione di tempo di rilassamento

⁽¹²⁾ Cerchiamo ora una schema per approssimare l'integrale collisionale in modo da scriverlo in termini di un tempo di rilassamento.

Se il sistema è in equilibrio, f è uguale a una certa funzione di distribuzione f_0 all'equilibrio. Se ad esso applichiamo una differenza di potenziale o un gradiente termico, ci sarà una deviazione dall'equilibrio che indichiamo con δf . Chiaramente, se la perturbazione è debole si avrà $\delta f \ll f_0$, per cui possiamo approssimare la funzione di distribuzione f come $f = f_0 + \delta f$ e quindi l'integrale collisionale, che in generale ha una dipendenza non lineare da f , può essere linearizzato rispetto alla funzione di distribuzione all'equilibrio tramite l'approssimazione

$$I_{\text{coll}}[f] \approx I_{\text{coll}}[f_0] + \left. \frac{\partial I_{\text{coll}}}{\partial f} \right|_{f=f_0} \delta f$$

⁽¹¹⁾ Da ora in poi, tratteremo la densità degli stati come costante. Quando non sarà possibile fare ciò lo specificheremo.

⁽¹²⁾ non mi piace come è scritta sta parte

La derivata funzionale $\partial I_{\text{coll}}/\partial f$ calcolata per la funzione di distribuzione all'equilibrio definisce l'inverso di un tempo di rilassamento⁽¹³⁾ τ che non è altro che un tempo di scattering, ossia il tempo medio che intercorre tra due processi di scattering dello stesso tipo. Possiamo dunque scrivere, scegliendo f_0 in maniera tale che $I_{\text{coll}}[f_0] = 0$,⁽¹⁴⁾

$$I_{\text{coll}}[f] \approx -\frac{1}{\tau} \delta f$$

Abbiamo un τ per ogni classe di collisioni, in particolare abbiamo un tempo di rilassamento τ_{el} per le collisioni elastiche con le impurità, un tempo $\tau_{\text{e-e}}$ per le collisioni tra elettroni e un tempo $\tau_{\text{e-ph}}$ per la collisioni con i fononi. Per confrontare questi tempi, possiamo moltiplicarli per la velocità di Fermi ottenendo così le lunghezze di scattering $\ell = v_F \tau$, che saranno quindi ℓ_{el} , $\ell_{\text{e-e}}$ e $\ell_{\text{e-ph}}$ rispettivamente. Confrontando queste diverse lunghezze di scattering, possiamo individuare diversi regimi di trasporto:

- Se la dimensione del sistema è molto più piccola di tutte le lunghezze di scattering, cioè se $L \ll \ell_{\text{el}}, \ell_{\text{e-e}}, \ell_{\text{e-ph}}$, dunque l'elettrone percorre l'intero sistema senza scattering, allora ci troviamo nel regime *balistico*;
- Se $\ell_{\text{el}} \ll L, \ell_{\text{e-e}}, \ell_{\text{e-ph}}$, ossia se la lunghezza di scattering con le impurità è molto più piccola della dimensione del sistema e delle altre lunghezze di scattering, allora ci troviamo nel regime *diffusivo*. In tale regime il processo più importante è quello di scattering con le impurità⁽¹⁵⁾ ed esso è il regime tipico di trasporto in semiconduttori;
- Se $\ell_{\text{e-e}} \ll L, \ell_{\text{el}}, \ell_{\text{e-ph}}$, cioè se la lunghezza di scattering con gli elettroni è molto più piccola della dimensione del sistema e delle altre lunghezze di scattering, allora ci troviamo nel regime di *quasi-equilibrio*. Tale regime è tipico dei sistemi in cui la mobilità è molto alta, come il grafene.

Vedremo che in tal caso la funzione di distribuzione nel sistema è approssimativamente espressa in termini di una funzione di distribuzione di equilibrio, ma con una dipendenza dal potenziale chimico e dalla temperatura che dipende dalla posizione, cioè $f = f_D(E, \mu(\mathbf{r}), T(\mathbf{r}))$. Ciò può sembrare contro-intuitivo, in quanto all'equilibrio temperatura e potenziale chimico non devono dipendere dalla posizione. Ciò che si intende con ciò è che all'interno del sistema c'è una regione di dimensioni dell'ordine di $\ell_{\text{e-e}}$ dove il sistema si comporta all'equilibrio, ma per comportarsi all'equilibrio significa che ci deve essere qualcosa che lo termalizza, ossia serve qualche processo fortemente non lineare che porti il sistema "alla più bassa energia". Per comprendere meglio tale concetto, consideriamo un elettrone ad altissima energia che viene lanciato dal reservoir dentro il sottosistema (cioè il sistema formato dal conduttore soltanto): se non si ha nessun processo di termalizzazione l'elettrone, che è detto elettrone caldo, attraversa indisturbato il conduttore; se invece l'interazione elettrone-elettrone è abbastanza importante, gli elettroni a più bassa energia scatterano con esso e si distribuiscono tra di loro l'energia termalizzandolo, cioè facendo diminuire la sua energia e il sistema ritorna sostanzialmente all'equilibrio. In definitiva, quello che succede al sistema in tale regime è che globalmente si trova fuori dall'equilibrio ma localmente si comporta come se si trovasse all'equilibrio.

(13) Per convincersi di ciò, si noti che nell'Eq.(1.7) i termini a sinistra hanno le dimensioni dell'inverso di un tempo

(14) non ho capito perché definisce questa cosa con il meno. Comunque a lezione non dice nemmeno la cosa che $I_{\text{coll}}[f_0] = 0$, l'ho presa dall'heikkilä.

(15) Ricordiamo che la lunghezza più piccola è sempre la più importante perché essa ci dà indicazione del processo di scattering più frequente.

(16) Ricordiamo che i fononi sono le vibrazioni reticolari in regime quantistico in un cristallo. Essi sono dei bosoni, dunque hanno una funzione di distribuzione di tipo Bose-Einstein caratterizzata da un potenziale chimico nullo e dalla temperatura pari a quella dell'ambiente.

- Infine, se $\ell_{e-ph} \ll L, \ell_{el}, \ell_{e-e}$, cioè se la lunghezza di scattering con i fononi⁽¹⁶⁾ è molto più piccola della dimensione del sistema e delle altre lunghezze di scattering quindi il processo di scattering più importante è quello tra elettrone e fonone, allora ci troviamo nel regime di *equilibrio locale*. In tale regime la funzione di distribuzione è approssimativamente espressa in termini di una funzione di distribuzione all'equilibrio, ma con un potenziale chimico che dipende dalla posizione mentre la temperatura è costante (ed è quella dell'ambiente), cioè $f = f_D(E, \mu(\mathbf{r}), T)$. In questo caso quindi gli elettroni vengono iniettati nel cristallo in cui abbiamo fononi in equilibrio a una data temperatura e a causa degli scattering con i fononi gli elettroni raggiungono la stessa temperatura. Più precisamente, quello che succede è che gli elettroni molto caldi iniziano ad emettere fononi e quindi si termalizzano, cioè la loro energia diminuisce e il sistema si trova in equilibrio locale.

1.4 Scattering elastico e regime diffusivo

Concentriamoci adesso sul regime diffusivo, in cui lo scattering elastico con le impurità è quello più importante. Per semplicità consideriamo lo scattering totalmente locale, nel senso che l'impurezza si trova nella posizione \mathbf{r} e l'elettrone scattera in \mathbf{r} ed esce in \mathbf{r} .

Tipicamente, in questo caso l'integrale collisionale assume la forma

$$I_{el}[f] = \sum_{\mathbf{p}'} J_{\mathbf{p}'\mathbf{p}} - J_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}$$

dove il termine $J_{\mathbf{p}'\mathbf{p}}$ tiene conto dei fenomeni di scattering in cui l'elettrone passa da impulso \mathbf{p}' a impulso $\mathbf{p} \neq \mathbf{p}'$; viceversa, il termine $J_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}$ tiene conto dei fenomeni di scattering in cui l'elettrone passa da impulso \mathbf{p} a impulso $\mathbf{p}' \neq \mathbf{p}$. Poiché siamo interessati a $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, T)$, il termine $J_{\mathbf{p}'\mathbf{p}}$ ci darà un aumento della probabilità perché prima dello scattering abbiamo un elettrone con impulso \mathbf{p}' e dopo lo scattering l'elettrone ha impulso \mathbf{p} , quindi c'è un incremento del numero di elettroni con un impulso \mathbf{p} ; al contrario, il termine $J_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}$ ci darà una diminuzione della probabilità. In particolare, $J_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}$ è dato da

$$J_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} = W_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, T) [1 - f(\mathbf{r}, \mathbf{p}', T)] \quad (1.8)$$

dove $W_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}$ è il rate di scattering da \mathbf{p}' a \mathbf{p} e il termine tra parentesi quadre tiene conto del fatto che gli elettroni sono fermioni, in quanto dobbiamo avere un elettrone che occupa lo stato ad impulso \mathbf{p} ma dobbiamo anche avere spazio con impulso \mathbf{p}' .⁽¹⁷⁾ L'Eq.(1.8) si può anche riscrivere come

$$J_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} = W_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} f(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{p}}, E, T) [1 - f(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{p}}', E', T)]$$

Concentriamoci adesso su $W_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}$: mediante la regola d'oro di Fermi possiamo scrivere

$$W_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \mathbf{p} | U | \mathbf{p}' \rangle|^2 \delta[\varepsilon(\mathbf{p}) - \varepsilon(\mathbf{p}')]]$$

dove la presenza della delta di Dirac ci dice che lo scattering è elastico.

1:39:40 circa

(17) Adriano aiutami questa parte non l'ho capita per niente.

Bibliografia

Libri di testo

- [Hei13] T.T. Heikkilä. *The Physics of Nanoelectronics: Transport and Fluctuation Phenomena at Low Temperatures*. Oxford Master Series in Physics. OUP Oxford, 2013. ISBN: 9780199592449.

