



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
Bibliografia	13

Prefazione

Introduzione

Ciao

CAPITOLO

0

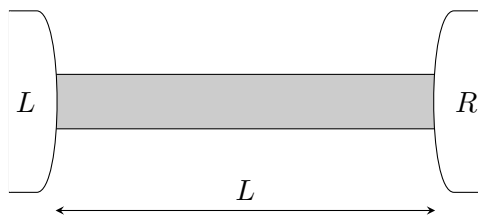
Teoria semiclassica

CAPITOLO

1

1.1 Equazione semiclassica di Boltzmann

Nello studio di una qualsiasi nanostruttura vi è la necessità di fabbricare il contatto tra questa struttura e i dispositivi di misura macroscopici. Tipicamente, ciò viene fatto strutturando elettrodi molto più ampi rispetto ai fili studiati, in modo da metterli in contatto con essi. Un tale elettrodo idealmente funge da serbatoio (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:



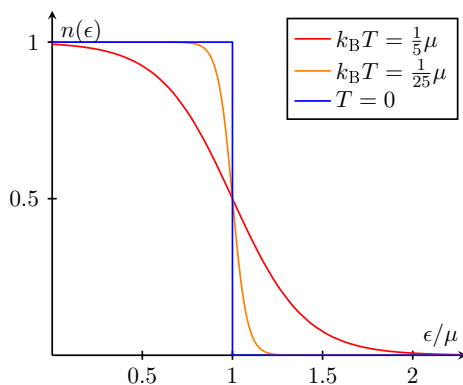
Per serbatoio intendiamo che il numero di elettroni è sostanzialmente invariante, per cui se ad esempio portiamo un elettrone dal serbatoio L al serbatoio R non ci accorgiamo di nessuna differenza, in quanto la differenza tra n e $n \pm 1$ elettroni è trascurabile.

Supponiamo che in tali serbatoi gli elettroni siano in equilibrio, allora essi potranno essere descritti mediante la distribuzione di Fermi-Dirac:

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

Essa ci dà il numero di elettroni aventi energia E , numero che viene regolato dalla presenza del potenziale chimico.

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



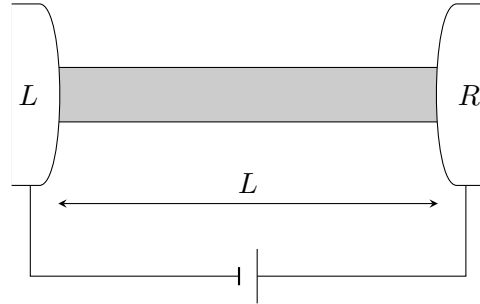
1.1	Equazione semiclassica di Boltzmann	5
1.2	Osservabili	11

(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 va a zero, essa assume l'andamento di 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.

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 termine intendiamo che nell'equazione di Boltzmann che a breve scriveremo compare un termine di tipo classico a sinistra e un termine di tipo quantistico a destra.

Possiamo usare un approccio del genere se possiamo descrivere gli elettroni come particelle. Quantitativamente, ciò significa che la lunghezza d'onda di Fermi, la quale ci dà la dimensione del pacchetto d'onda e che è data da

$$\lambda_F = \frac{\pi \hbar}{E_F}$$

dove E_F è l'energia di Fermi, è molto più piccola di tutte le scale di lunghezza del sistema. Ciò significa che deve essere molto più piccola delle dimensioni tipiche del sistema ma anche dei diversi liberi cammini medi, cioè delle distanze medie percorse tra due fenomeni di scattering degli elettroni con le impurità del sistema, con i bordi del sistema, con i fononi o con altri elettroni. In particolare, nella nostra trattazione siamo interessati a tre tipi di liberi cammini medi:

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

(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?

Precisiamo che:

- Nello scattering tra elettroni e impurezze lo scattering è elastico, per cui l'energia dell'elettrone si conserva;
- Lo scattering elettrone-elettrone non conserva l'energia del singolo elettrone ma globalmente l'energia si conserva. 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 $E_1 \neq E'_1$ e $E_2 \neq E'_2$ ma $E_1 + E_2 = E'_1 + E'_2$;

- Infine 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

A seguito di questi processi di scattering, se essi sono abbastanza efficienti, si ha un "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. Bisogna però stare attenti a che processo 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.

Il nostro obiettivo è di trovare la funzione di distribuzione nel sistema. Cerchiamo quindi una funzione $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ 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 dello spazio delle fasi ci dia il numero medio di elettroni nella posizione \mathbf{r} aventi impulso \mathbf{p} all'interno del volume $d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{p}$. A rigor di termini, il principio di indeterminazione di Heisenberg afferma che non possiamo simultaneamente determinare con precisione la quantità di moto e la posizione di un elettrone, mettendo in discussione la stessa validità del concetto di funzione di distribuzione $f(\mathbf{r}, \mathbf{p})$. Tuttavia, f può essere definita nel momento in cui il principio di indeterminazione ci dà un'incertezza che è più piccola della lunghezza di Fermi, dunque della lunghezza del pacchetto d'onda, per cui tale incertezza può essere trascurata.

Per trovare la funzione di distribuzione ne osserviamo 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⁽⁵⁾ 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 il quale tiene conto di tutti i processi di scattering, abbiamo che

$$f(\mathbf{r} + \mathbf{v} dt, \mathbf{p} + \mathbf{F} dt, t + dt) - f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = I_{\text{coll}}[f] dt \quad (1.2)$$

Il membro destro dell'(1.2) rappresenta la correzione quantistica.

Consideriamo il membro di sinistra: se dt è sufficientemente piccolo possiamo espandere il primo termine fino al primo ordine, ottenendo

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

Inserendo il risultato trovato e semplificando otteniamo

$$\frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} \cdot \mathbf{v} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} \cdot \mathbf{F} + \frac{\partial f}{\partial t} = I_{\text{coll}}[f] \quad (1.3)$$

l'(1.3) rappresenta l'equazione di Boltzmann.

Per inciso, senza il termine collisionale l'equazione di Boltzmann prende il nome di equazione di Vlasov, che quindi è

$$\frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} \cdot \mathbf{v} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} \cdot \mathbf{F} + \frac{\partial f}{\partial t} = 0 \quad (1.4)$$

Quindi, quando i processi di scattering sono trascurabili e dunque il sistema si comporta in maniera pulita ma lo possiamo ancora trattare semiclassicamente. Si presti attenzione al fatto che tale fatto non è per niente banale, in quanto come abbiamo detto se un sistema è pulito vuol dire che sono trascurabili i processi di scattering, ma ciò implica che probabilmente si verificano processi coerenti, quindi fenomeni di interferenza quantistica, per non potremmo utilizzare questa trattazione. In ultima analisi, le situazioni in cui è possibile utilizzare l'Eq.(1.4) sono poche.

Torniamo adesso all'(1.3). È 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⁽⁶⁾.

In tale forma, il termine contenente la derivata rispetto a \mathbf{p} nell'Eq.(1.3) diventa

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

(5) 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.

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

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} ,⁽⁷⁾ per cui in definitiva abbiamo che

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

⁽⁷⁾ Infatti, esplicitamente si ha

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

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'(1.3) 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.(1.3) 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,

$$\left(\frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} - q \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial f}{\partial E} \right) \cdot \mathbf{v} + \frac{\partial f}{\partial t} = I_{\text{coll}}[f] \quad (1.5)$$

Se inglobiamo nell'energia la dipendenza del potenziale dalla posizione, il che corrisponde a dire che f ha una dipendenza del tipo $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, E - q\phi(\mathbf{r}))$, il termine tra parentesi della (1.5) diventa proprio $\partial f / \partial \mathbf{r}$, per cui possiamo scrivere più sinteticamente

$$\frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} \cdot \mathbf{v} + \frac{\partial f}{\partial t} = I_{\text{coll}}[f] \quad (1.6)$$

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

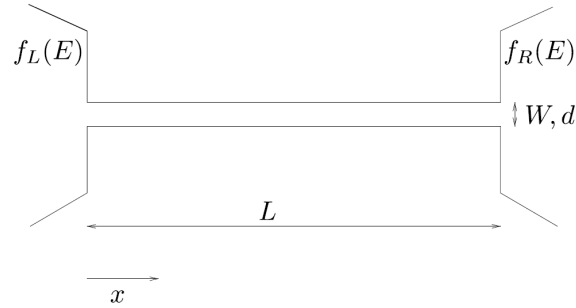
$$\frac{1}{p_F} \frac{qV}{L} = \frac{1}{p_F} \frac{qV}{L} \frac{p_F}{m} \frac{m}{p_F} = qV \frac{m}{p_F^2} \frac{1}{L} \frac{p_F}{m}$$

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.(1.6), 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.⁽⁸⁾



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.(1.3) 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 delle 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.⁽⁹⁾

⁽⁸⁾ Disegno da fare il Latex, ora mi secco.

⁽⁹⁾ 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 di-

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 di portatori di carica del sistema sarà data da⁽¹⁰⁾

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

dove g_s è la degenerazione di spin, che nel caso in esame è semplicemente pari a 2.

Analogamente, la densità di corrente sarà data da⁽¹¹⁾

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

Passando in coordinate polari possiamo riscrivere tale quantità come

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

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.

1:00:15 circa

(10) Infatti integrando f rispetto all'impulso otteniamo la densità di probabilità di trovare un elettrone in posizione \mathbf{r} , cioè proprio la densità di portatori.

(11) Abbiamo scritto la velocità come $\mathbf{v}(\mathbf{p})$ per sottolineare che essa è data da $\nabla_p \varepsilon(\mathbf{p})$.

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.

