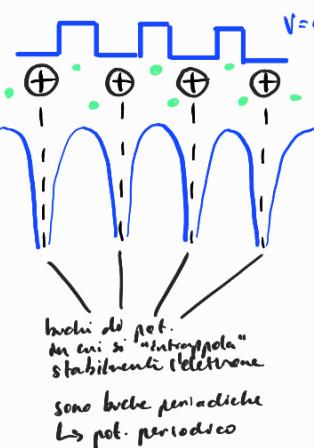


- 1) stato
- 2) statistica di popolaz. } delle parti celle
- 3) trasporto

o operano su un solido (un metallo in questo particolare caso)



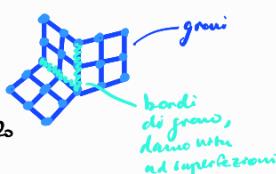
- quanti elettroni vedono gli ion come dei buchi di potenziale (interagiscono tramite una forza Coulombiana, $\propto 1/r$)
- gli elettroni si muovono e interagiscono con queste buche
- gli ioni positivi sono fermi quindi tranne il loro potenziale periodico. Tanto invece gli elettroni come un potenziale spaziale uniformemente negativo quindi scendono in quello periodico dei $(+)$. Nel complesso dunque otteniamo comunque un pot. periodico

reticolli cristallini

- solidi
- ⇒ cristallini: struttura ordinata regolare periodica
 - ⇒ amorfi: disordinati, non periodici (es. la maggior parte dei reti. La diff con i liquidi è l'altissima viscosità)
 - ⇒ policristallini: aggregato di tanti grani cristallini

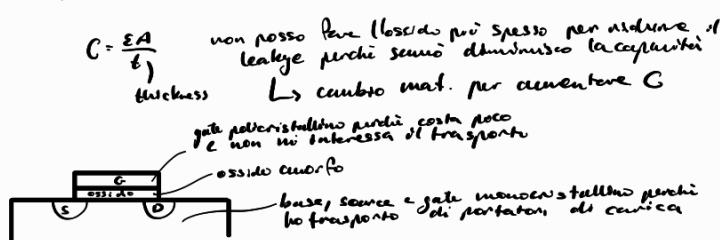


- i wafer di silicio sono monocristallini. SiO_2 invece è amorfo
- se avessi bordi di grano, avrei problemi (es. ci si mettano i dopanti, o creano un path preferito dagli elettroni)

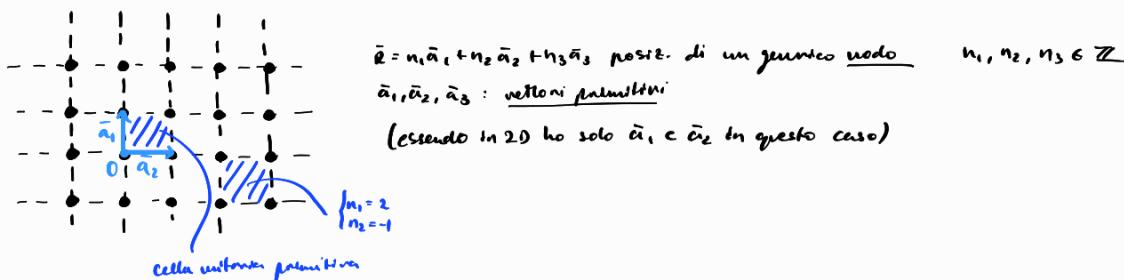


- policristallini possono andare bene quando non ho trasporto

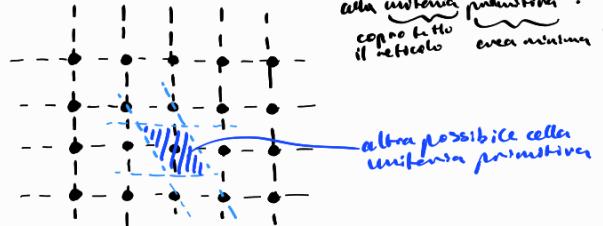
• HfO_2 sta sostituendo SiO_2 perché $E_r \approx 20$ (più alta del SiO_2) che mi permette di rendere lo strato di ossido più sottile



reticolo di Bravais

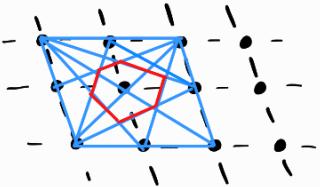


cella unitaria primitiva: se la rete di vettori del reticollo di Bravais copre perfettamente il reticollo, essa minima.

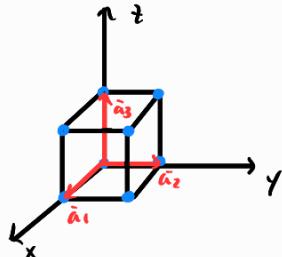


cella di Wigner-Seitz.

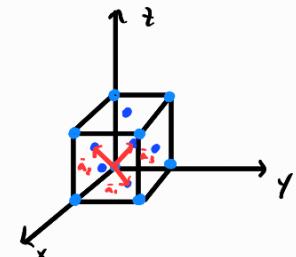
\Rightarrow il modo più utile ai punti interni della cella di Wigner-Seitz è sempre il modo di ripetimento.



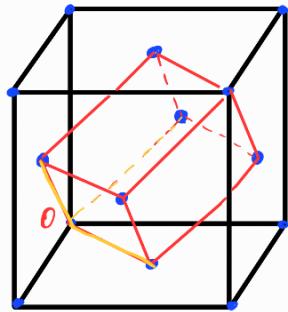
celle cubiche



cubo semplice

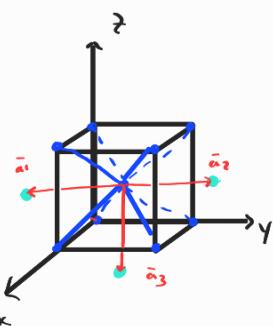


=>



FCC - face centered cubic

- Forma la forma primitiva ponendo ai centri faccia più vicini
- non è primitiva (ma è unitaria)
↳ se mi sposto di uno lungo uno dei vettori ho una sovrapposizione.

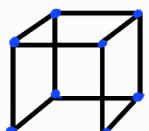


BCC - body centered cubic

- per formare una forma primitiva punti congiungono il centro di un cubo con i centri degli adiacenti

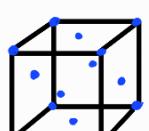
- cella primitiva da una cella FCC
- deve collegare l'origine ai 3 centri faccia più vicini

n° di atomi per cella



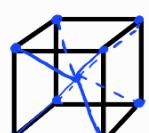
$$8 \text{ atomi} \cdot \frac{1}{8} = 1$$

↳ 1 atomo è diviso tra 8 celle



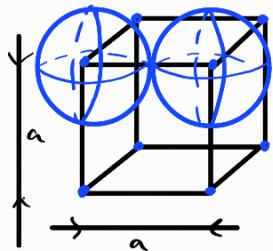
$$8 \cdot \frac{1}{8} + 6 \cdot \frac{1}{2} = 1 + 3 = 4 \Rightarrow \text{Il volume è 4 volte la cella primitiva.}$$

↳ gli atomi nei centri delle facce sono condivisi con le celle adiacenti



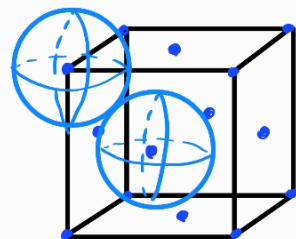
$$8 \cdot \frac{1}{8} + 1 = 2 \quad \text{anche questo non è primitivo}$$

Packing Factor



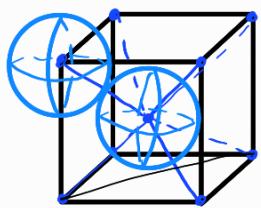
$$PF = \frac{V_{atomi}}{V_{cella}} = \frac{\frac{4}{3}\pi\left(\frac{a}{2}\right)^3 \cdot 4}{a^3} = \frac{a^3}{6} \approx 0.52$$

è il 52% della cella è occupata da atomi, il resto è vuoto



$$PF = \frac{V_{atomi}}{V_{cella}} = \frac{\frac{4}{3}\pi\left(\frac{\sqrt{2}}{4}a\right)^3 \cdot 4}{a^3} \approx 0.74$$

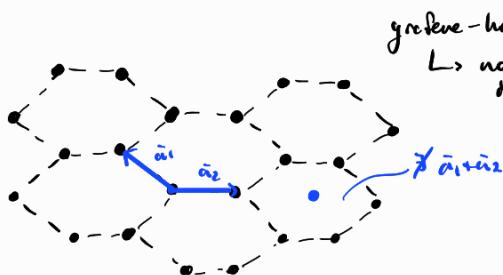
è il max PF nei solidi



$$PF = \frac{V_{atomi}}{V_{cella}} = \frac{\frac{4}{3}\pi\left(\frac{\sqrt{3}}{4}a\right)^2 \cdot 2}{a^3} \approx 0.68$$

7 sistemi (e.s. cubico)

14 reticolati tot. (i conductibili e sistemi)

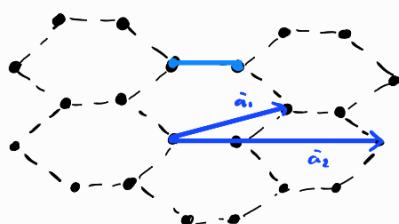


gretene-honeycomb structure

\rightarrow non è un reticolo di Bravais! Alcuni vettori ad andare da uno dei vettori primi, \vec{a}_1 , e \vec{a}_2 andano da tutti i nodi, ma molti vengono anche nodi che non esistono!

struttura = reticolo + base } coppia di atomi:

vett. primi: un
descrivono un
reticolo di Bravais

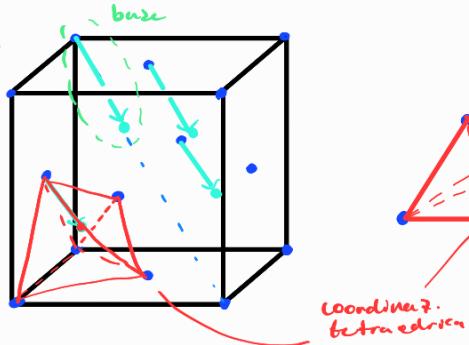


\rightarrow nei nodi descritti dal reticolo di Bravais ci metto la base (in questo caso la coppia di atomi) farece che un atomo \rightarrow resco a descrivere tutta la struttura

struttura del diamante

\rightarrow non è un reticolo di Bravais

sono gli altri
4 atomi che
rimangono
attorno alla
cella originale
dopo la
traslazione.



• ottego la struttura duplicando e traslando la cella FCC
di γ_4 lungo la diagonale, ottengo 2 FCC

• struttura = reticolo + base
vettori primi:
quelli della FCC

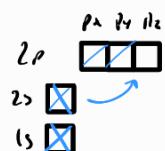
$$\bullet \text{n}^{\circ} \text{ atomi} = 8 \cdot \frac{1}{8} + 6 \cdot \frac{1}{2} + 4 = 8$$

atomi traslati
da case vicine
all'origine della FCC



• ibridizzazione sp^3
• tra atomi centro
vicino c'è un legame covalente

$$\bullet PF = \frac{\text{V atomi}}{\text{V cella}} = \frac{4\sqrt{3}\left(\frac{\sqrt{3}}{8}a\right)^3}{a^3} \approx 0,34 \quad \text{metri del BCC!}$$



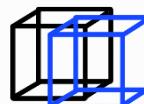
geometria
tetraedrica

III	IV	V
B	C	N
Al	Si	P
Ga	Ti	As

Σ danno tutti ibridizione sp^3

struttura della zinco-blenda (diamanti) (ZnAs, PbS)

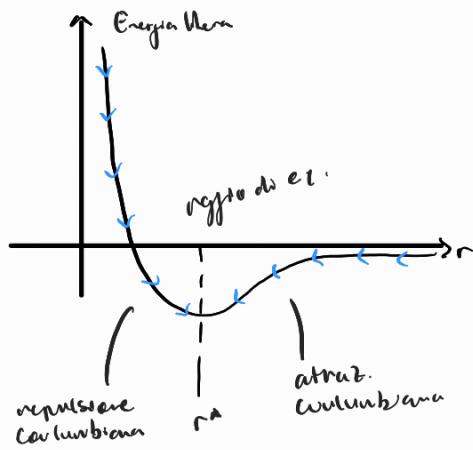
FCC
di Zinco FCC di
Arsenico



• i metalli prediligono strutture FCC e BCC poiché hanno un PF maggiore

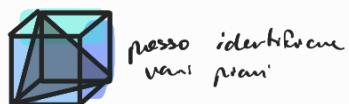
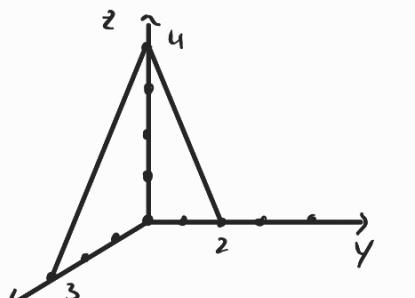
\Rightarrow i metalli vogliono minimizzare l'energia libera del sistema, tendono a compattarsi

$$+ \cdot + \cdot \Rightarrow + - + -$$



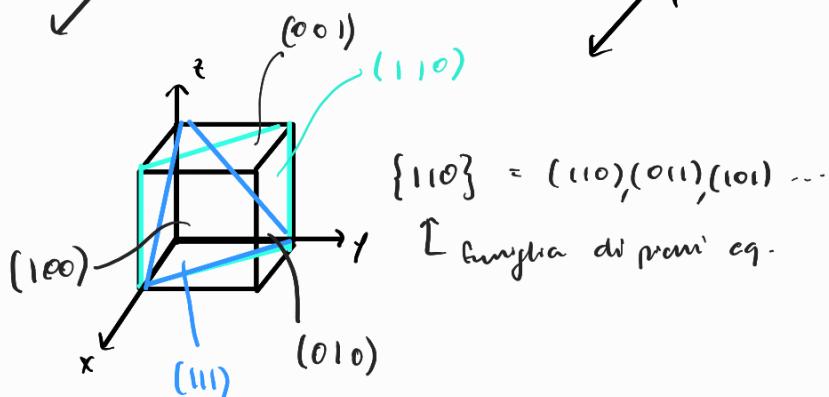
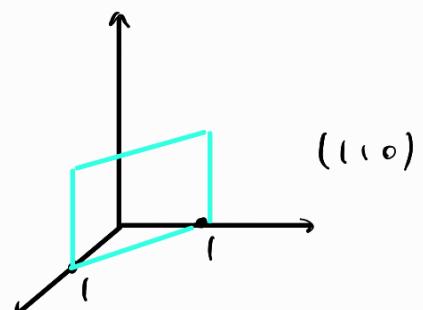
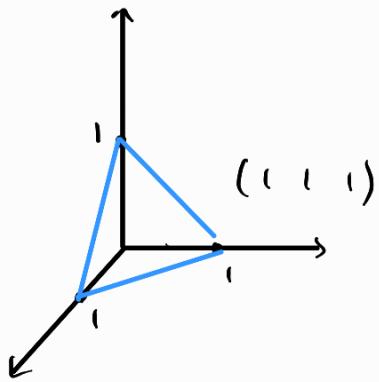
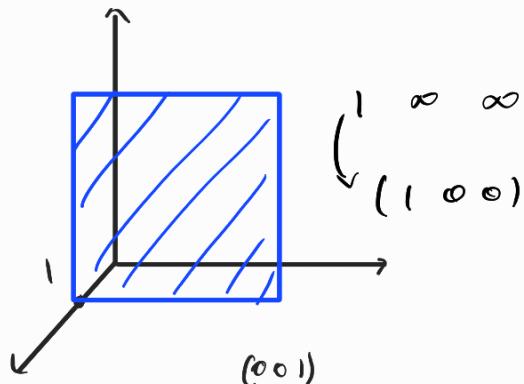
quando coi contatti l'atraz. Coulombiano avvicina gli atomi. Poco a un punto avviene un colpo di attrazione che viene respinto.
↳ ho un r^* ottimale di energia libera.

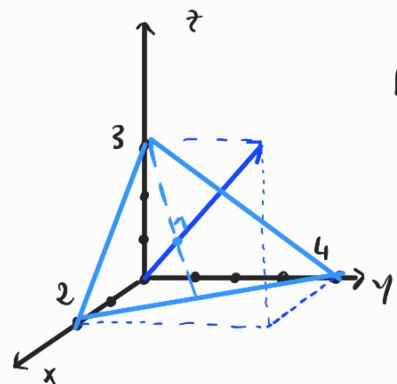
Indice di Miller



se ho numeri ug. $\Rightarrow (4\bar{6}3)$
($\text{LCM}=12$)

$$\Rightarrow (4\bar{6}3)$$





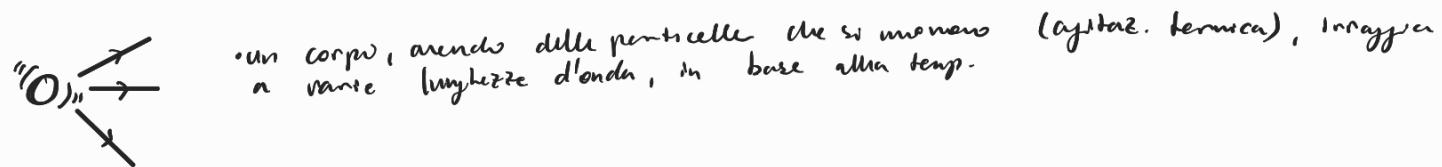
[2 4 3] indica la direzione parallela all'asse z.
 (2 4 3) formulano la direzione z.
 • La direzione è \perp al piano se $(a b c) \perp [a b c]$

meccanica quantistica

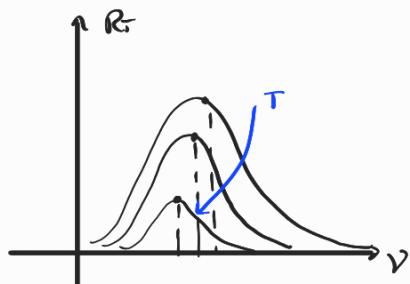
- fisica del discreto, particolare

radiaz. del corpo nero

radiaz.: capacità di un corpo di irraggiare



corpo nero: corpo ideale. Tutta la radiaz. che mette in rete assorbita.



R_T : radianza spettrale

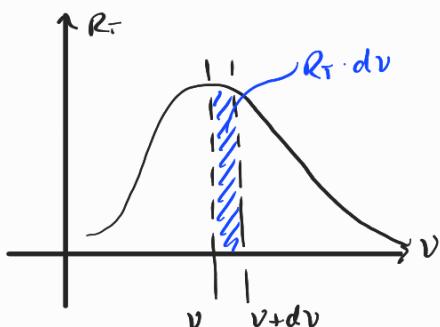
$$\left[\frac{J}{s \text{ cm}^2 \text{ Hz}} \right]$$

$$R_T(v) \cdot dv \Rightarrow \text{radiaz. fra } v \text{ e } v+dv$$

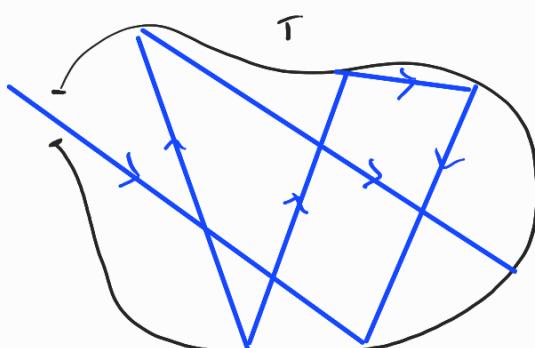
(sono in un intervallo di freq.)

$$\int_v^\infty R_T(v) dv = \sigma T^4 \quad \text{legge dell'irraggiamento (di Stefan)} \quad (1879)$$

$$T \cdot \lambda_{\max} = 2,9 \cdot 10^{-3} \left[\frac{\text{m} \cdot \text{k}}{\text{metri kelvin}} \right] \quad \text{legge di Wien} \quad (1893)$$

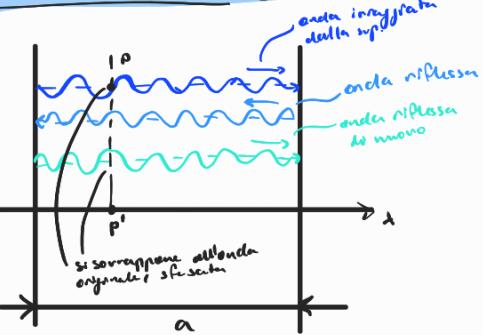


modellizzaz. del corpo nero



- la luce che entra nella cavità è impraticabile da fermare
- la sup. è ad una certa temp. T , quindi maggiora all'eq.
→ devono essere soddisfatte certe condiz. affinché l'eq. venga rispettato
- vogliamo dare una espressione analitica della R_T in uscita dal foro della cavità
L'obiettivo è la densità di energia all'interno della cavità

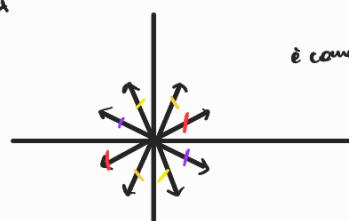
Cavità monodimensionale



nascono degli effetti costruttivi e distruttivi d'interferenza

la sfasatura dipende dal cammino ottico: $2a$

le onde che tornano sfocate dopo un percorso ottico di $2a$ non possono esistere: all'interno del corpo, quindi tutte quelle che percorrono $2a, 4a, 6a$ e così segnano sfociate non esistono



è come sommare tanti fasci sfracati:

\hookrightarrow sommandoli tutti si annullano

Onda Nera sfaccata:

$$e^{i(kx-wt)} \cdot e^{ikx}$$

Intervento di sfaccamento

$$\Rightarrow e^{ikx} = e^{ik(x+2a)} \Rightarrow e^{ik2a} = 1 = e^0 \quad \text{soddisfatto per } e^{ikx} = e^{i2\pi n}, \text{ condiz. di interf. costruttiva} \quad (\text{si sommano in fase})$$

sfaccatura nella pos. x (P) sfaccatura nel punto $x+2a$ (P')

$$\Rightarrow k2a = 2\pi n \Rightarrow k = \frac{\pi}{a} \cdot n \quad (n \in \mathbb{N}) \quad \text{condizione di esistenza dei modi}$$

n di onde

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

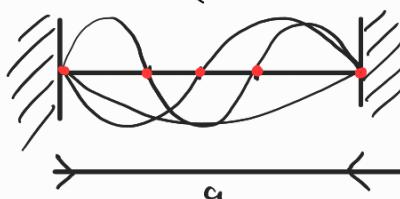
$$\lambda = \nu \Rightarrow \nu = \lambda = \frac{n}{2a} \cdot c = \nu$$

c'è un solo insieme di freq. che possono essere modi
 \hookrightarrow i modi sono i raggi che hanno frequenze ammesse nelle cavità

è equivalente
(nel corpo nero)

alle onde staz. annesse tra due punti vicini di una corda vibrante
possiamo pensare che le pareti su cui riflettono le onde siano dei punti fissi

$$a = n \cdot \frac{\lambda}{2} \quad (\text{che si traduce poi nel } \nu = \frac{c}{2a} n \text{ trovato prima})$$



Onda staz.: oscilla nel tempo ma ha dei nodi

(vs. onda viaggiante dove anche i nodi sono spostati)

\hookrightarrow dei punti fermi che hanno sempre modulo 0

$$e^{i(kx-wt)} + e^{-i(kx-wt)} = \left(\frac{(e^{ikx} + e^{-ikx})}{2} \right) \cdot 2 \cdot e^{-iwt} = 2 \cos(kx) e^{-iwt}$$

$\cos(kx)$

onda staz.

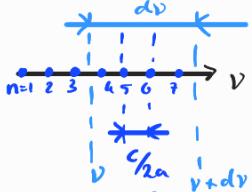
(la presenza del cos mi identifica la stazionarietà dell'onda)

\Rightarrow due onde viaggianti in verso opposto con uguali modi danno un'onda staz.

onde in verso opposto

ci chiediamo ora: quanti modi ci sono tra ν e $\nu + d\nu \rightarrow N(\nu) d\nu$

\hookrightarrow densità di modi

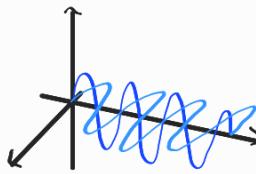


Free spectral range: non c'è radiaz. in questo range

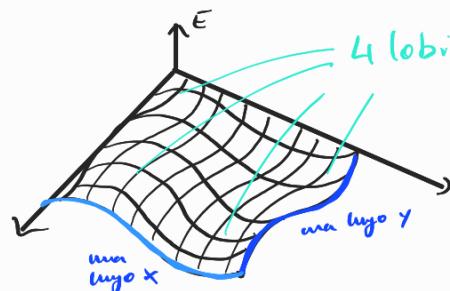
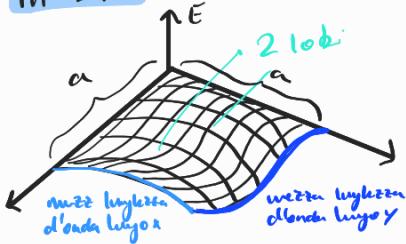
$\frac{d\nu}{\nu/2a}$ ovvero il n° di intervallini fra nell'intervallo $d\nu$

$$N(\nu) d\nu = 2 \cdot \frac{dV}{\pi/2a} \cdot \frac{1}{a} \quad \text{n° di modi} \Rightarrow N(\nu) d\nu = \frac{4}{c} dV \quad (10)$$

ci sono 2 polarizz. dell'onda EM (campo E e campo B), ciascuno a cui posso associare un'energia. cioè per una freq. ho 2 modi:



in 2D



per trovare le freq. di vibraz. della membrana

$$\Rightarrow E = E_0 \sin(k_x x) \cdot \sin(k_y y) \cdot \sin(\omega t)$$

ho un vincolo su k_x e su k_y

$$\begin{cases} a = n_x \frac{\lambda_x}{2} \Rightarrow k_x = \frac{\pi}{a} n_x \\ a = n_y \frac{\lambda_y}{2} \Rightarrow k_y = \frac{\pi}{a} n_y \end{cases}$$

che relaz. c'è fra k_x , k_y e ν ? (ho due vincoli per k_x e k_y ma non ci trovano le freq. ammesse dei modi)

$$(w = 2\pi\nu)$$

$$E = E_0 \sin(k_x x) \cdot \sin(k_y y) \cdot \sin(\omega t)$$

$$\begin{aligned} &= E_0 \frac{e^{ik_xx} - e^{-ik_xx}}{2i} \cdot \frac{e^{ik_yy} - e^{-ik_yy}}{2i} \cdot \sin(\omega t) \\ &= -\frac{E_0}{4} \left\{ e^{i(k_xx+k_yy)} - e^{-i(k_xx+k_yy)} - e^{i(k_yy-k_xx)} + e^{-i(k_yy-k_xx)} \right\} \cdot \sin(\omega t) \\ &= -\frac{E_0}{2} \left\{ \frac{e^{i(k_xx+k_yy)} + e^{-i(k_xx+k_yy)}}{2} - \frac{e^{i(k_yy-k_xx)} + e^{-i(k_yy-k_xx)}}{2} \right\} \cdot \sin(\omega t) \\ &= -\frac{E_0}{2} \cdot \left\{ \underbrace{\cos(k_xx+k_yy)}_{|\vec{k}| \cdot \vec{r}} - \underbrace{\cos(k_xx-k_yy)}_{|\vec{k}'| \cdot \vec{r}} \right\} \cdot \sin(\omega t) \end{aligned}$$

$$|\vec{k}| = |\vec{k}'| = \sqrt{k_x^2 + k_y^2} = \frac{\pi}{a} \cdot \sqrt{n_x^2 + n_y^2} \quad \text{ho ottenuto un "unico } \vec{k} \text{"}$$

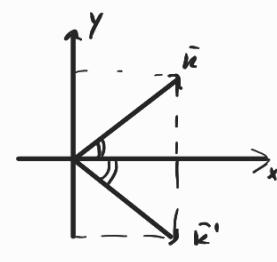
$$\Rightarrow \lambda = \frac{2a}{k} \Rightarrow \nu = \frac{c}{\lambda} = \frac{c}{2a} k = \frac{c}{2a} \cdot \frac{\pi}{a} \sqrt{n_x^2 + n_y^2} = \frac{c}{2a} \cdot n \quad n_x, n_y \in \mathbb{N}$$

"stesso" risultato in 1D solo che ora $n \in \mathbb{N}$

$$\Rightarrow \nu = \frac{c}{2a} \sqrt{n_x^2 + n_y^2} \quad \text{con } n_x, n_y \in \mathbb{N}$$

$$\Rightarrow \nu = \frac{c}{2a} n \quad \text{con } n = \sqrt{n_x^2 + n_y^2}, n_x, n_y \in \mathbb{N}$$

$$\begin{cases} \vec{k} = [k_x \ k_y] \\ \vec{k}' = [k_x \ (-k_y)] \\ \vec{r} = [x \ y] \end{cases}$$



$$|\vec{k}| = |\vec{k}'|$$

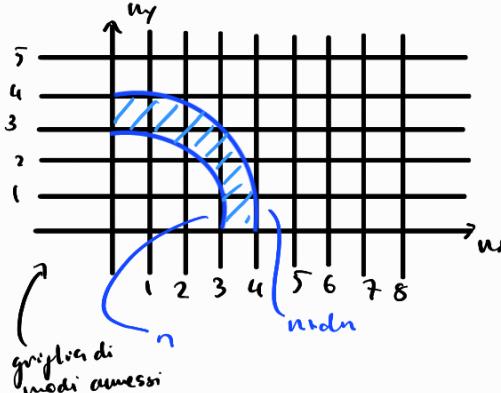
$$N(v)dv = \frac{4}{c} dv$$

effettua un cambio di var. : $v = \frac{c}{2a} \cdot n \Rightarrow dv = \frac{c}{2a} dn$

$$\Rightarrow N(v)dv = N(n)dn$$

(raggio)

$$\text{in } 2d : n = \sqrt{nx^2 + ny^2} \quad (\text{è una circonferenza nel piano})$$



quanti nx, ny cadono nell'intervalle n e $n+dn$? Cioè vogliate trovare il n° di modi tra n e $n+dn$.

$((\phi, \theta))$ non è un modo ammesso. Avrei $v = \phi, \lambda = \infty$ che non ha senso)

$$\Rightarrow N(n)dn = 2 \cdot \frac{2\pi n dn}{4} \cdot \frac{1}{1} = n^2 dn = n^2 modi = \pi n^2 dn$$

(sup. della corona)
2 modi per ogni freq. ammessa
1/4 di corona
area della cella cunitaria)

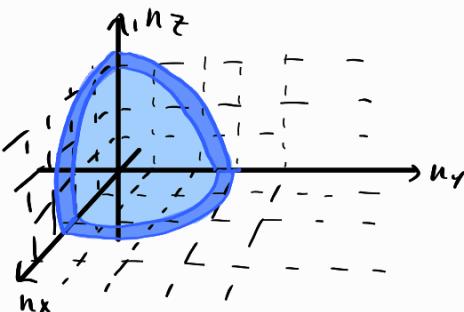
$$\Rightarrow N(v)dv = \pi n^2 dn = \pi \frac{2a}{c} v dn = \pi \left(\frac{2a}{c}\right)^2 v dv = \frac{4\pi}{c^2} v^2 dv \quad (= \tau v^2 dv)$$

$n = \frac{2a}{c} v$ $dn = \frac{2a}{c} dv$ orario per α^2
per normalizzare rispetto l'energia

$$\Rightarrow N(v)dv = \frac{4\pi}{c^2} v^2 dv \quad (\propto v^2)$$

in 3D

$$n = \sqrt{nx^2 + ny^2 + nz^2} \quad (\text{onde con 3 vett. d'onda, } k_x, k_y, k_z)$$



$$N(n)dn = 2 \cdot \frac{4\pi n^2 dn}{8} \cdot \frac{1}{1} = n^2 alle = n^2 modi = \pi n^2 dn$$

2 modi per freq.
1/8 della corona
area della cella cunitaria

$$v = \frac{c}{2a} n \Rightarrow N(n)dn = \pi n^2 dn = \pi \frac{4a^2 v^2}{c^2} dn = \pi \frac{4a^2 v^2}{c^2} \cdot \frac{2a}{c} dv \cdot \frac{1}{a^3} = \frac{8\pi}{c^2} v^2 dv$$

nonnulli 2 da
per 1/8 volume

$$\Rightarrow N(v)dv = \frac{8\pi}{c^2} v^2 dv \quad (\propto v^2)$$

densità di energia

- abbiamo dunque trovato un n°/densità di modi, adesso devo associargli un'energia
- i modi sono oggi potenzialmente ammessi, non è detto che poi ci siano effettivamente.

\Rightarrow devo valutare $\langle E \rangle$

princípio equipartiz. dell'energia $\Rightarrow \langle E \rangle = \frac{3}{2} kT = kT$
(termodynamica classica)

2 gradi di libertà : es. pendolo



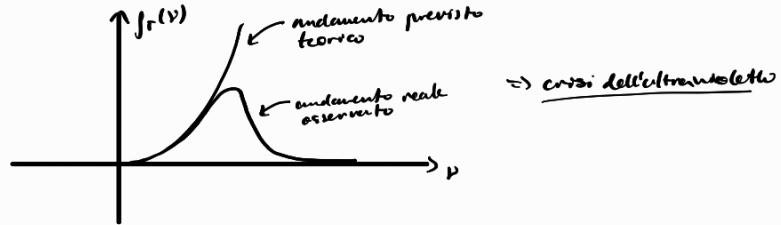
$$\int_T(v)dv = \frac{8\pi}{c^2} v^2 kT dv \quad (n \text{ modi} \cdot \text{energia associata})$$

\uparrow
densità spettrale di
energia alla temp. T

- 1) energia associata alla velocità
La energia cinetica
- 2) energia associata alla posiz.
La energia potenziale

$$\hookrightarrow f_T(v) dv = \frac{8\pi}{c^3} v^2 kT dv \Rightarrow f_T(v) = \frac{8\pi}{c^3} v^2 kT$$

Risultato di Rayleigh-Jeans



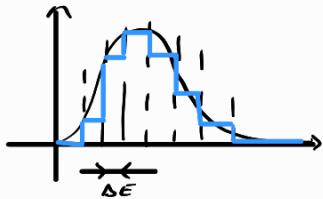
nuova teoria di Planck (1905)

Planck si concentra su $\langle E \rangle = \frac{1}{2} kT$ e pensa che sia il l'errore

$$\langle E \rangle = \frac{\int E \cdot P(E) dE}{\int P(E) dE} = \frac{\int E \cdot e^{-E/kT} dE}{\int e^{-E/kT} dE} = kT \quad (\text{se } E \text{ continuo})$$

La distribuzione probabilistica di energia (non è una densità di prob.)

$$\text{Pensiamo a } E \text{ quantizzata} \Rightarrow \int_0^\infty E \cdot P(E) dE \Rightarrow \sum_{n=0}^{\infty} n \Delta E \cdot e^{-n \Delta E / kT}$$

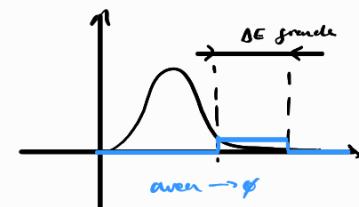


$$\hookrightarrow \frac{\sum n \Delta E^2 e^{-n \Delta E / kT}}{\sum e^{-n \Delta E / kT}} \xrightarrow[\text{per } \Delta E \rightarrow 0]{} \phi$$

è un studio che potrebbe spiegarmi perché a HF $E \rightarrow \phi$



Intuitivamente:



Planck pensa: $\Delta E = nh\nu$ $n \in \mathbb{N}$

L'cost. di Planck

Questa: BF \Rightarrow ΔE piccolo e appross. zero (l'integrale HF \Rightarrow il rapporto (energia tot. del sistema) $\rightarrow \phi$)

serie geo.: $\sum q^n \text{ con } q = \frac{1}{e^x}$

$$\Rightarrow \frac{\sum n h\nu e^{-\frac{n h\nu}{kT}}}{\sum e^{-\frac{n h\nu}{kT}}} = kT \cdot \frac{\sum n x e^{-nx}}{e^{-nx}} = -kT x \cdot \frac{d}{dx} \log(\sum e^{-nx})$$

Inoltre: $\frac{d}{dx} \log(\sum e^{-nx}) = \frac{1}{\sum e^{-nx}} \cdot \sum (-n)e^{-nx} = -\frac{\sum n e^{-nx}}{\sum e^{-nx}}$

$$\Rightarrow -kT x \cdot \frac{d}{dx} \log\left(\frac{1}{1-e^{-x}}\right) = kT x \cdot \frac{d}{dx} \log(1-e^{-x}) = kT x \cdot \frac{1}{1-e^{-x}} \cdot e^{-x} = kT x \cdot \frac{1}{e^x-1} \Rightarrow \langle E \rangle = \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}$$

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

a BF cambia con la formula nuova classica

L'energia del fotone aumenta al crescere di ν . Perché allora $\langle E \rangle \rightarrow \phi$ per $\nu \rightarrow \infty$?

Lo nonostante l'energia del fotone cresca, più c'è alta l'energia meno è probabile che ci sia ($P(E) = e^{-E/kT}$)

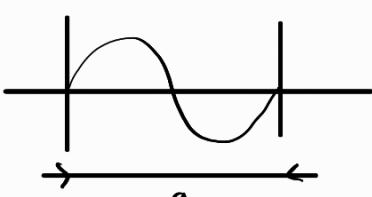
per cui prob. di avere alta energia

$$\Rightarrow f_T(v) = \frac{8\pi}{c^3} v^2 \cdot \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}$$

$$E = nh\nu \quad (\text{verrà più corretto } E = (n+\frac{1}{2})h\nu)$$

$E = h\nu$ energia del singolo fotone

Lo cioè i modi hanno associati dei pacchetti di energia discreti (fotoni)



$$\begin{cases} \nu = \frac{c}{2\pi} n \\ \lambda = 2\pi \cdot \frac{1}{n} \end{cases}$$

gli associano anche una q.t. di moto: $P = \frac{h}{\lambda}$ (q.t. moto del fotone)

$$\left\{ \begin{array}{l} E = h\nu \\ p = h/\nu \end{array} \right.$$

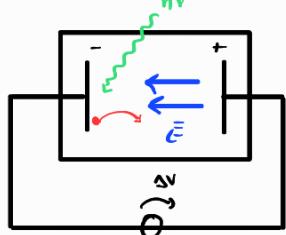
quanto di energia corpuscolo di luce
 $(h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s})$ cost. di Planck

caratteristiche corpuscolari

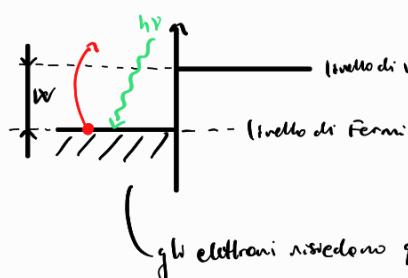
$$\left\{ \begin{array}{l} \nu \\ \lambda \end{array} \right.$$

caratteristiche ondulatorie

effetto fotoelettrico

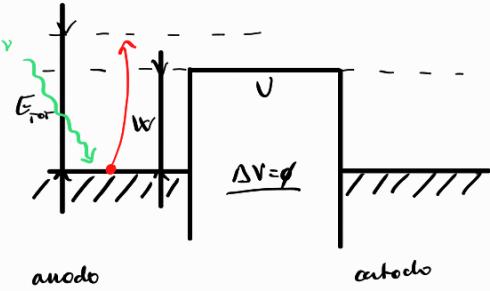


• l'onda è un campo oscillante. L'elettrone viene accelerato e acquisisce E_k , suff. per superare la soglia di energia (W-work function) per liberarsi dal metallo



W : lavoro che deve compiere per estrarre un elettrone
 $V = -qV > 0$: energia pot. dell'elettrone

$$(q = -1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C})$$

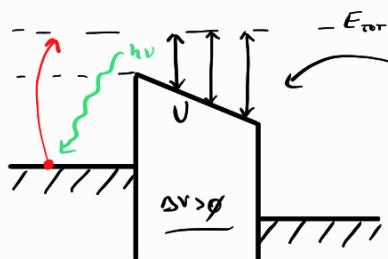
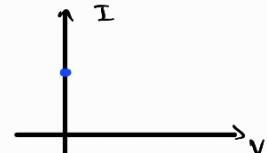


• $\Delta V = 0 \Rightarrow$ anodo e catodo allo stesso livello energetico

$$E_{tot} = \frac{p^2}{2m} + U \quad \text{energia tot. dell'elettrone}$$

• E_k cost. \Rightarrow l'elettrone arriva al catodo con V_{cost} . (non ci sono forze esterne in gioco che possano accelerare l'elettrone, essendo $\Delta V = 0$) e quindi $E = \phi$

• vedo una corrente, anche in assenza di $\Delta V \Rightarrow$

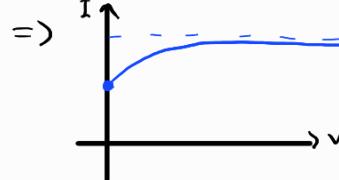


• V decresce lin. $\Rightarrow \bar{E} = -\Delta V$, \bar{E} è un campo cost. $\Rightarrow V$ è lineare

• $K = E_{tot} - U$ cresce lin. \Rightarrow l'elettrone viene accelerato dal campo \bar{E} cost.

• scorre una certa corrente, maggiore di prima questo perché con $\Delta V = 0$ non tutti gli elettroni a la ferma ad arrivare al catodo (venendo estratti a "casaccio"). Con $\bar{E} \neq 0$ vengono raccolti e portati al catodo più efficientemente

$\hookrightarrow I$ cresce e poi satira (per un I_{max} perché al più posso raggiungere tutti gli elettroni emessi)

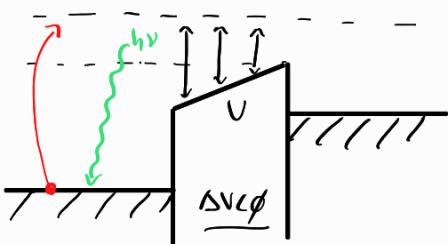


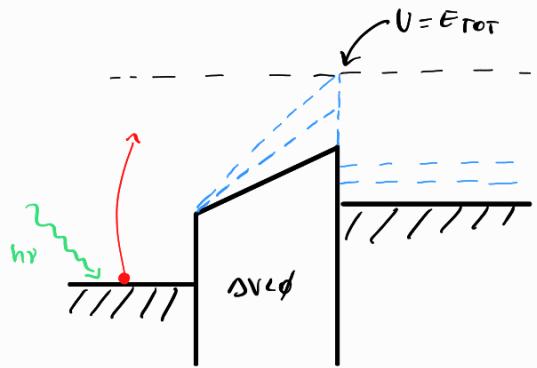
• l'elettrone fa più fatica a superare la soglia di potenziale e arriva all'altro elettrodo

• $K = E_{tot} - U$ decresce lin. perché l'elettrone viene respinto dal campo \bar{E} cresce lin.

• a una certa tensione cessa di scorrere corrente

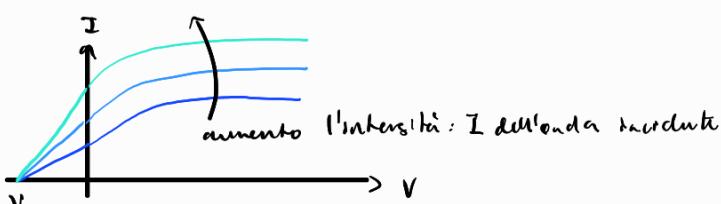
$$\hookrightarrow \text{condiz. } I \text{ corrente} \Rightarrow E_k = \frac{p^2}{2m} > \phi$$





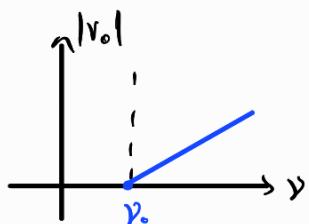
• l'elettrone non ce la fa più ad uscire per superare la soglia
 \hookrightarrow condiz. limite: $K = E_{tot} - V > 0 \Rightarrow K = \phi = E_{tot} - U \Rightarrow U = E_{tot}$

• $\exists V_0$ t.c. $U = E_{tot}$



V_0 non dipende dall'intensità, ma solo dalla freq.

per $V < V_0$ non osserviamo più l'effetto fotoelettrico



• V_0 è una misura dell'energia dell'elettrone

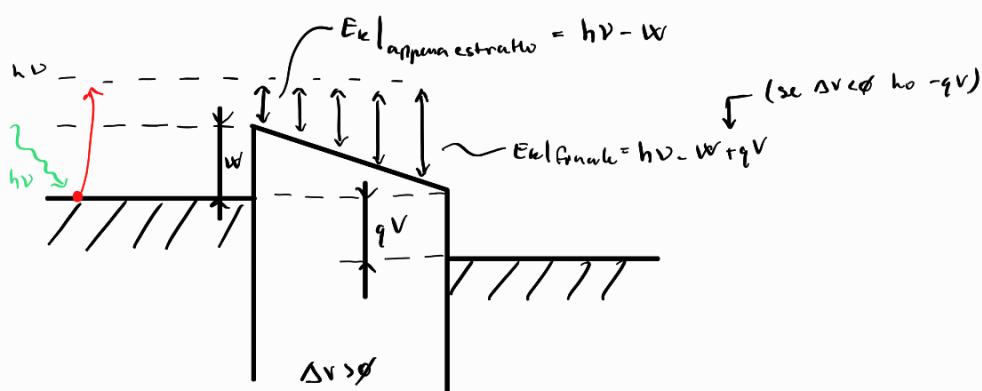
- aumentando I (intensità) dovrei vedere cambiare V_0 perché aumento E_{tot} e quindi servirebbe una V_0 maggiore per contrastare l'elettrone (e quindi bassa energia)
- un altro problema è proprio l'esistenza di una V_0 limite. Dovrei riuscire a compensare la BF con una maggiore, più alta intensità. Ma V_0 è solo dipendente da ν . (il problema non è la dipendenza della freq., ma la non dipendenza dall'intensità)

L) Einstein (1905)

• applica la teo. dei quanti di Planck

$E = h\nu$ energia acquisita dall'elettrone

quante' l'energia cinetica nell'elettrone appena fuori uscito dall'elettrodo?



$$\text{condiz. } \exists \text{ corrente} \Rightarrow E_k \text{ finale} = h\nu - W + qV = \frac{p^2}{2m} > 0$$

$$\hookrightarrow \nu \geq -\frac{(h\nu - W)}{q} := V_0$$

(se $h\nu > W$ vuol dire che l'energia acquisita è suff. da superare la soglia. se così non fosse $V_0 > \phi$ che non ha senso)

• dipende solo da ν ! $V_0 \propto \nu$

$$V_0 = -\frac{h}{q}\nu + \frac{W}{q} \Rightarrow$$

per trovare V_0 suppongo:

$$V_0 = \phi \Rightarrow V_0 = W/h$$

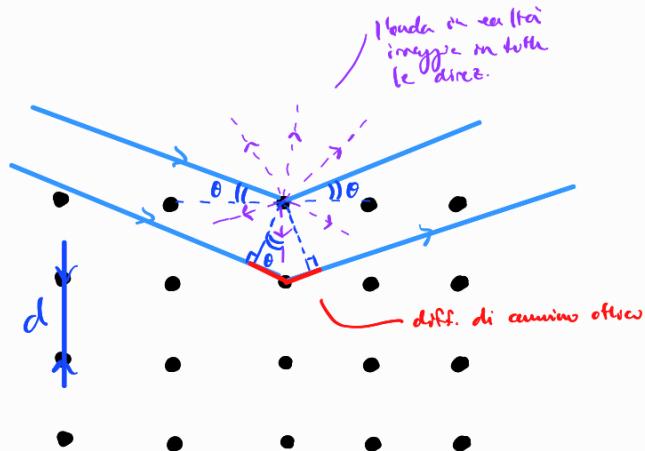
	onde	particelle
prop. ondulatorie	λ, V, I	$\lambda = h/p$ $V = E/h$
prop. corpuscolari	$E = hV$ $p = h/\lambda$	$p = mv$ $E = \sqrt{p^2/2m + V}$

potrebbe essere che anche le particelle hanno prop. ondulatorie

↳ de Broglie (anni '20)

comportamento caratteristico delle onde \Rightarrow interruzione / diffrazione

esperimento di diffraz. di Davisson - Germer



- reticolato cubico di Nickel: lo uso come reticolato di diffraz.

- ΔS diff. ampio ottico $= 2ds\sin\theta$

per avere interf. costruttiva $\Rightarrow 2ds\sin\theta = n\lambda$

↳ $\sin\theta = \frac{n\lambda}{2d} \Leftrightarrow \lambda \leq 2d$ è un vincolo sulle lunghezze d'onda che posso usare per questo esperimento

$d \approx \text{\AA}$ ($0,1 \text{ nm}$) \Rightarrow devo usare raggi X

diffuz. di Bragg

- mi interessa solo la riflessione secondo la legge di Snell, ignoro tutti gli altri fasci che vengono nelle altre direz., è una iper-semplificaz. che però rende fattibile la trattaz. della diffrazione del reticolato di nickel

$V = 50 \text{ eV} = k$ energia che incide col piombo

$$d = 0,91 \text{ \AA}$$

↳ vediamo dei picchi di diffraz. \Rightarrow effettivamente gli elettroni hanno prop. ondulatorie!

misuravano anche $\theta = 65^\circ$:

$$\underbrace{2ds\sin\theta}_{2 \cdot 0,91 \text{ \AA} \cdot \sin 65^\circ} = \lambda = 1,65 \text{ \AA}$$

$$2 \cdot 0,91 \text{ \AA} \cdot \sin 65^\circ$$

$$\lambda_{\text{de Broglie}} = \frac{\lambda}{\sqrt{2mE}} = 1,65 \text{ \AA}$$

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{mv^2}{2}$$

(ho solo energia cinetica)

} \Rightarrow cioè la premessa teorica di de Broglie coincideva con i risultati sperimentali!

de Broglie (1924)

Schrödinger (1926)

Born (1927)

eq. Schrödinger

$$\begin{cases} \lambda = h/p \\ V = E/h \end{cases}$$

- $\Psi(x, t)$ risultato dell'eq. di Schrödinger, simile al modo in cui E è sol. dell'eq. di Maxwell
 \Rightarrow sommiamo ad E , è il modulo quadro che ci dà info interessanti $\Rightarrow |\Psi|^2$ mi dà la densità di prob. di trovare l'elettrone

"requisiti" eq. di Schrödinger

- * eq. diff. alle derivate parziali
- * compatibilità con principio di conservaz. energia $\Rightarrow E = K + V$
- * $\lambda = h/p$; $V = E/h$ ($K = p^2/2m$)
- \downarrow
- * $V = V_0 = \text{cost.} \Rightarrow K = \text{cost.} \Rightarrow p = \text{cost.} \Rightarrow \lambda = \text{cost.}$
- * Unicità \Rightarrow con la sovrapp. eff. nascono gli effetti di interferenza

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

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

\uparrow

$$\begin{cases} \lambda = h/p \\ E = \hbar\nu \end{cases}$$

$$\begin{cases} p = h/\lambda = \frac{h}{\lambda} \\ K = \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2}{2m\lambda^2} \end{cases}$$

$$h\nu = h \cdot \frac{\omega}{2\pi} = \hbar\omega$$

$$\begin{cases} E = \hbar\nu \\ p = \hbar k \\ K = p^2/2m \end{cases}$$

$$\Rightarrow \Psi \cdot \left(\frac{\hbar k^2}{2m} + V \right) = \Psi \cdot \hbar\omega$$

considero $V = V_0$ cost. (generalmente $V = V(x, t)$) \Rightarrow se V cost., λ cost.

$\hookrightarrow \Psi$ è una onda plana: $\Psi(x, t) = \Psi_0 e^{i(kx - \omega t)}$

(non è ragionevole dire che lo è, però è plausibile come ipotesi. Effettivamente poi è così.)

$$\begin{cases} \frac{\partial \Psi}{\partial x} = \Psi_0 \cdot (ik) e^{i(kx - \omega t)} = ik\Psi \\ \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \Psi_0 \cdot (ik)^2 e^{i(kx - \omega t)} = -k^2\Psi \quad \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \Psi V = -\frac{i}{\hbar} \frac{\partial \Psi}{\partial t} = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \\ \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \Psi_0 (-i\omega) e^{i(kx - \omega t)} = -i\omega\Psi \end{cases}$$

\Rightarrow generalizzo a $V = V(x, t)$ (non è una dim. questa, sono i "passaggi logici" per arrivare alla eq. finale)

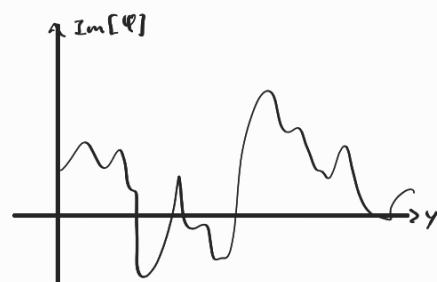
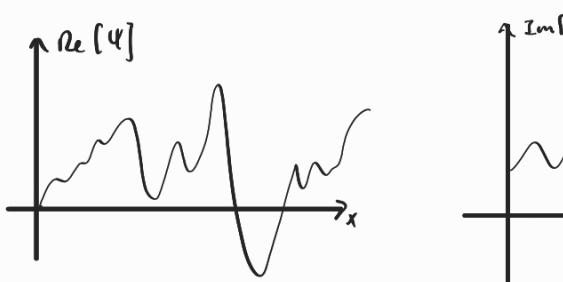
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \Psi V(x, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

eq. di Schrödinger (monodim.)

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

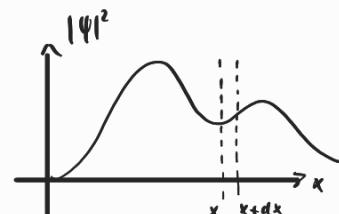
(in 3D)

- Schrödinger esprime una eq. che incorpora la teo. di de Broglie
- Borne a dare il significato di Ψ



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

$$\psi^* = \psi_0 e^{-i(kx - \omega t)} \Rightarrow$$



$$\Rightarrow |\psi|^2 dx = p(x) dx$$

prob. di trovare
la particella tra
 x e $x+dx$

normalizziamo: $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx = 1$ (attenzione: non normalizzabilità dell'onda piena)

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x |\psi|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* x \psi dx \quad \text{val. d'aspettazione della pos. +}$$

cioè non so dove sta la particella, so dove sta mediorient.

$$\langle f(x) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 f(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} (\psi^* f(x) \psi) dx$$

posso def. anche per la qt. di moto p_x ? \Rightarrow NO!

$$\langle p_x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* p_x(x) \psi dx$$

non riesco a determinare $p_x(x)$

principio di indeterminaz. di Heisenberg

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \neq 0$$

↑ ↑
indeterminaz. indet. della
della pos. qt. di moto

Δp_x può $\rightarrow 0$ però $\Delta x \rightarrow \infty$
(o viceversa)

$\Delta x \rightarrow 0$ però $\Delta p_x \rightarrow \infty$

se potessi trovare $p_x(x)$ (quindi sapendo x : $\Delta x \rightarrow 0$) determinerei $p_x(x)$ invece Il principio di indet. di Heisenberg ci dice che non è possibile

$$\Psi(x, t) = \Psi_0 e^{i(kx - \omega t)} \Rightarrow \frac{\partial \Psi}{\partial x} = \Psi_0 \cdot i k e^{i(kx - \omega t)} = \hat{p} \Psi$$

$$-i\hbar \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial x} = i k \Psi \cdot i \hbar \Rightarrow -i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial x} = \underbrace{i k}_{\hat{p}} \Psi = \hat{p} \Psi$$

↳ introduco un operatore momento : $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$

$$\hookrightarrow \langle p_x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \hat{p} \Psi dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* (-i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial x}) dx$$

(nel caso di onda piena $\langle p_x \rangle$ è un valore preciso
↳ ha una delta di Dirac. In gen. $\langle \cdot \rangle$ potrebbe, per
esempio, essere il val. medio di una transizione)

generalizzando il concetto:

$$\langle f \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \hat{f} \Psi dx$$

\hat{f} operazione

$$\hat{f} \Psi_f = f \Psi_f$$

↑
corrispondenti autovalori
autofunzioni

(analoga con autoval. e autovet: $A\vec{v} = \lambda \vec{v}$)

$$K = \frac{p^2}{2m}$$

$\hat{K} = \hat{p}^2 \cdot \frac{1}{2m} = \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \cdot \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Rightarrow \hat{K} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$ operatore energia cinetica

↑
operatore
applicato
2 volte

$$\Psi = \Psi_0 e^{i(Kx-wt)} \Rightarrow \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \Psi_0 \cdot (-iw) e^{i(Kx-wt)} = -iw \Psi$$

$$\Rightarrow i\hbar \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -iw\Psi \cdot i\hbar \Rightarrow i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \underbrace{i\hbar w \Psi}_{E} \Rightarrow \hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$
 operatore energia tot.

$$\hat{E} = \hat{K} + \hat{V} \Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V \quad \text{è l'eq. di Schrödinger!!}$$

↑
 $V = V$ è solo funz. di x e t

↳ cioè l'eq. di Schrödinger è la conservaz. dell'energia espressa in modo operatoriale

comutatore

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

prova a comutare:

↳ se l'orario è indifferente $\Rightarrow [\hat{A}, \hat{B}] = \phi$
 $\Rightarrow \hat{A}, \hat{B}$ comutano le stesse autofunzioni

$$\begin{cases} \hat{A}F = AF \\ \hat{B}F = BF \end{cases}$$

$$\begin{aligned} & \hat{x} = x \\ & [\hat{x}, \hat{p}_x] \Psi = x \left(-i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) + \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial x} [x\Psi] \right) \\ & = -ix \hbar \frac{\partial \Psi}{\partial x} + i\hbar \left\{ 1 \cdot \Psi + \frac{\partial \Psi}{\partial x} \cdot x \right\} \\ & = -i\hbar x \frac{\partial \Psi}{\partial x} + i\hbar \Psi + i\hbar x \frac{\partial \Psi}{\partial x} \\ & = i\hbar \Psi \end{aligned}$$

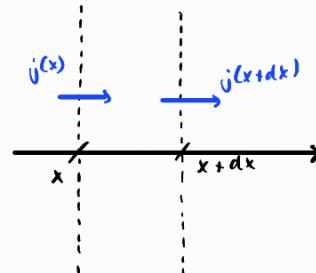
$\Rightarrow [\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar \neq \phi \Rightarrow x \in \hat{p}_x$ non comutano \Leftrightarrow non hanno le stesse autofunzioni. Sono in dissidio fond. \Leftrightarrow sono afflitte da una indeterminaz.

↳ principio di indeterminaz.
di Heisenberg

$$\left[\hat{p}_x, \frac{\hat{p}_x^2}{2m} \right] = \phi \Rightarrow \text{op. qt. di moto e op. energia cinetica comutano} \Rightarrow \text{una autofunz. di } \hat{p}_x \text{ lo è anche di } \hat{K}$$

↳ se se una so anche l'altra con precisione ∞ (come mi aspettavo d'altronde, se so \hat{p}_x so anche $\hat{p}_x^2/2m$)

flusso quantistico



- j flusso di particelle descritte da Ψ

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

↑
flusso
entrante ↑
flusso
uscente
↑
probabilità (essendo le particelle
governate da Ψ si parla sempre
di probabilità)

flusso: $\left[\frac{n^o \text{ particelle}}{m^2 \cdot s} \right]$

se $j(x) > j(x+dx)$ \Rightarrow aumenta la probabilità di trovare particelle tra x e $x+dx$

se $j(x) < j(x+dx)$ \Rightarrow diminuisce la probabilità di trovare particelle tra x e $x+dx$

$$j(x) - j(x+dx) = j(x) - \left[j(x) + \frac{\partial j}{\partial x} dx \right] \Rightarrow -\frac{\partial j}{\partial x} dx = \frac{\partial \rho}{\partial t} \cdot dx \Rightarrow -\frac{\partial j}{\partial x} = \frac{\partial \rho}{\partial t}$$

↑
sviluppo di Taylor
al I° ordine

 $| \Psi |^2 dx = \rho$

$$\frac{\partial}{\partial t} [\Psi^* \Psi] = \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \cdot \Psi + \frac{\partial \Psi}{\partial t} \cdot \Psi^*$$

$$\text{eq. Schrödinger: } -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} + V\Psi^* = -i\hbar \frac{\partial \Psi^*}{\partial t}$$

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

qui cambia il segno perché
quando faccio la derivata
del complesso coniugato
rispetto al tempo: $i \rightarrow -i$

$$= \frac{i\hbar}{2mi} \left(\Psi \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} - \Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \right) = \frac{\hbar}{2mi} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left(\Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} - \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right)$$

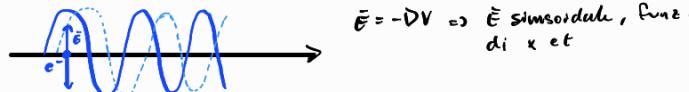
$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \left(\Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} - \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) &= \frac{\partial \Psi}{\partial x} \cdot \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} + \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} \cdot \Psi - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \cdot \Psi^* \\ &= \left(\frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} \cdot \Psi - \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \cdot \Psi^* \right) \end{aligned}$$

$$\Rightarrow -\frac{\partial j}{\partial x} = \frac{\partial |\Psi|^2}{\partial t} = \frac{\hbar}{2mi} \frac{\partial}{\partial x} \left(\Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} - \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) \Rightarrow j = \frac{\hbar}{2mi} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right) \quad \text{def. flusso quantistico}$$

risolv. eq. Schrödiger

- per semplificare la vita poniamo potenziale indipendente dal tempo

$V(x, t)$ è funz.
della pos. e del tempo



$E = -DV \Rightarrow E$ sinusoidale, funz.
di x e t

↳ gen. nei dispositivi elettronici non è questo il caso $\Rightarrow V = V(x)$

l'eq. di Schrödiger diventa:

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

$$\Psi(x, t) = \Psi(x) \cdot \Psi(t) \quad \text{ipotesi}$$

↳ non si separano le var. per avere delle eq. diff. separate, una nel tempo
e una nello spazio

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

$$\Rightarrow f(x) = g(t) \Leftrightarrow \begin{cases} f(x) = E \text{ (una cost.)} \\ g(t) = E \end{cases}$$

eq. diff. con var. separate

$$f(x) \rightarrow \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\Psi = E\Psi \quad \text{eq. Schrödinger indipendente dal tempo}$$

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

↑
operatore Hamiltoniano

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

operatore associato all'energia quando operiamo sulla $\Psi(x)$

$$g(t) \Rightarrow \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{iE}{\hbar} \Psi(t) \Rightarrow \Psi(t) = \Psi_0 e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$$

quando risolvo trovo più autofunzioni e autovettori corrispondenti: $V(x) \rightarrow \hat{H}\Psi = E\Psi \rightarrow$ autofunz. Ψ_1, Ψ_2, \dots autoval. E_1, E_2, \dots

Là la sol. gen. sarà, per la somm.p. degli effetti: $\Psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \Psi_n(x) e^{-\frac{E_n t}{\hbar}}$ è lo stato "puro", generale in cui si trova l'elettrone
coff. generalmente complesso, contiene Ψ_0 .

autostato: $\Psi(x,t) = a_n \Psi_n(x) e^{-\frac{E_n t}{\hbar}} \Rightarrow$ stato stationario

· stationario perché: $|\Psi|^2 = |a_n|^2 |\Psi_n|^2$ non dipende da t

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 dx = \int \sum_{n=1}^{\infty} a_n^* \Psi_n^* e^{i \frac{E_n t}{\hbar}} \cdot \sum_m a_m \Psi_m e^{-i \frac{E_m t}{\hbar}} dx$$

$\sum_{n,m} a_n^* a_m e^{-i \frac{E_n - E_m}{\hbar} t} \cdot \int \Psi_n^* \Psi_m dx$
 $= \sum_n a_n^* a_n e^{-i \frac{E_n - E_n}{\hbar} t} = \sum_n |a_n|^2 e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}}$
 $\sum_n |a_n|^2 = 1$
 avendo tenuto conto che i Ψ_n sono ortogonali.

$\sum_{n,m} a_n^* a_m e^{-i \frac{E_n - E_m}{\hbar} t} = \sum_{n \neq m} a_n^* a_m e^{-i \frac{E_n - E_m}{\hbar} t} = 0$
 $\Leftrightarrow S_{nm} = \begin{cases} 1 & \text{se } n=m \\ 0 & \text{se } n \neq m \end{cases} \Rightarrow$ "sopravvivono" solo i termini "diagonali" ($n=m$)
 (perché le autofunz. sono ortonormali)

cioè $|a_n|^2$ mi dà la prob. di trovare l'elettrone in un certo stato

la 1a mi dice la prob. di trovare l'elettrone con stato E_1

la 2a mi dice la prob. di trovare l'elettrone con stato E_2

ecc.

concetto di misura

$\Psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \Psi_n(x) e^{-\frac{E_n t}{\hbar}}$ è lo stato puro generale. Quindi lo stato preciso dell'elettrone non è determinato. Potrebbe essere in uno dei qualsiasi stati energetici E_n

↓
misuro (perturbo il sistema)

collasso in un certo stato E_n (la funz. d'onda "collassa")

$$\langle E \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x,t) \hat{H} \Psi(x,t) dx = \int \sum_n a_n^* \Psi_n^* e^{i \frac{E_n t}{\hbar}} \hat{H} \sum_m a_m \Psi_m e^{-i \frac{E_m t}{\hbar}} dx$$

$$= \sum_{n,m} a_n^* a_m e^{-i \frac{E_n - E_m}{\hbar} t} \int \Psi_n^* \hat{H} \Psi_m dm =$$

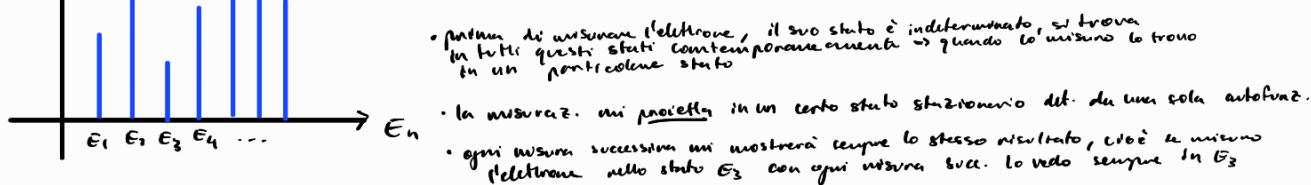
$\langle E \rangle = \sum |a_n|^2 E_n$

media pesata con prob. $|a_n|^2$

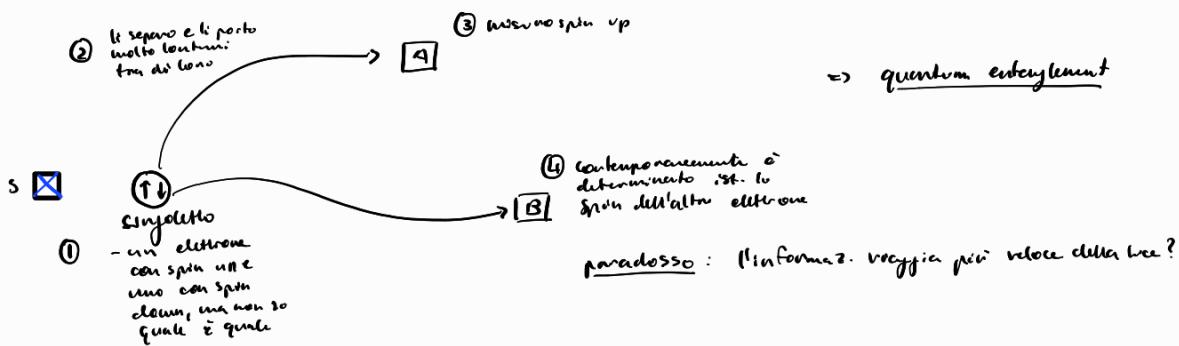
$\hat{H} \Psi_m = H \Psi_m$

analogo
a come
avevamo
trovato $\sum |a_n|^2$

pero probabilistico di trovare
l'elettrone in uno stato



paradosso Einstein-Podolsky-Rosen



- abbiamo fatto entangolare due elettroni \Rightarrow ho una unica funz. Wanda che governa i due elettroni. Uno ha \uparrow e l'altro \downarrow , ma non so quale. La funz. allora mi dice solo che uno è \uparrow l'altro \downarrow

caso $V=0$

$$\text{eq. Schrödinger: } -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V(x) \Psi = E\Psi \quad (\hat{H}\Psi = E\Psi)$$

$$\Rightarrow \Psi(x,t) = \Psi(x)e^{-i\omega t}, \quad \omega = \frac{E}{\hbar}$$

• consideriamo il $V=0$ particelle libere, non ci sono forze

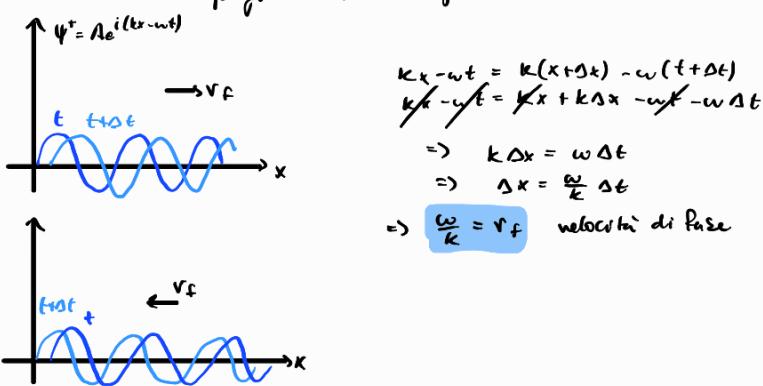
$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = E\Psi \quad \Rightarrow \hat{K}\Psi = k\Psi \quad \hat{k} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \quad \begin{matrix} \text{operatore} \\ \text{energia cinetica} \end{matrix}$$

gli autovalori saranno E_k

$$\Rightarrow \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2} \Psi = -k^2 \Psi \quad \text{con } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

$$\Rightarrow \text{risolvo} \Rightarrow \Psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

$$\hookrightarrow \Psi(x,t) = \underbrace{Ae^{i(kx-\omega t)}}_{\substack{\text{onda inizianta} \\ \text{progressiva}}} + \underbrace{Be^{-i(kx+\omega t)}}_{\substack{\text{onda inizianta} \\ \text{regressiva}}} \quad \text{funz. d'onda staz. } (|\Psi|^2 = \text{cost.}, \text{ non dipende da } t)$$



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

• considero la progressione per semplicità

$$\begin{aligned} \langle p_x \rangle &= \int \Psi^* \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) \Psi dx \\ &= \int \Psi^* \left(-i\hbar \frac{dk}{dx} \right) dx \\ &= \int \Psi^* (-i\hbar ik) \Psi dx \\ &= \hbar k \int \Psi^* \Psi dx \\ &= \hbar k \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \langle p_x \rangle = \hbar k \quad (-\hbar k \text{ si considera la progressiva})$$

$$\bullet \lambda = \frac{\hbar}{P} = \frac{2\pi}{k} \Rightarrow P = \frac{\hbar}{2\pi} k = \hbar k \Rightarrow p = \hbar k \quad \text{ritrovo la relaz. di de Broglie}$$

$\Psi = Ae^{ikx}$ è autoval. sia dell'operatore energia cinetica, sia dell'operatore qt. di moto

\hookrightarrow d'altronde ce lo poteremo aspettare, \hat{p} e \hat{k} comutano: $[\hat{k}, \hat{p}] = \left[\frac{\hbar^2}{2m}, \hat{p} \right] = 0$

$$\Rightarrow \hat{p}_x \Psi = p_x \Psi \Rightarrow \underbrace{-i\hbar \frac{d}{dx} \Psi}_{\hat{p}_x} = -i\hbar \cdot ik \Psi = \hbar k \Psi \Rightarrow \hat{p}_x \Psi = p \Psi$$

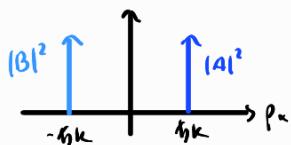
$\hookrightarrow \Psi = Ae^{ikx}$ è effettivamente una autoval. di \hat{p}

considerando $\Psi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$:

$$\begin{aligned} \langle p_x \rangle &= \int \Psi^* \hat{p}_x \Psi dx = \int (Ae^{-ikx} + Be^{ikx}) \cdot (-i\hbar \frac{d}{dx} [Ae^{ikx} + Be^{-ikx}]) dx \\ &= -i\hbar \int (Ae^{-ikx} + Be^{ikx}) (ikAe^{ikx} - ikBe^{-ikx}) dx \\ &= \hbar k \int |A|^2 - ABe^{-i2kx} + AB e^{i2kx} - |B|^2 dx \\ &= \hbar k \int |A|^2 - |B|^2 + AB(e^{i2kx} - e^{-i2kx}) dx \quad \text{integrale del sin fun } \phi, \text{ la cost. è} \\ &\quad \text{la rimpicciolitura di } A \text{ e } B \\ &= \hbar k \int_{-\ell}^{\ell} (|A|^2 - |B|^2) + 2AB \cdot i \sin(2kx) dx \end{aligned}$$

$$\langle p_x \rangle = \hbar k |A|^2 - \hbar k |B|^2$$

- $\langle p_x \rangle$ non è più perfettamente det., con certe assunze ottengo $\hbar k$, mentre $-\hbar k$. Dopo di misure trovano il val. att. aspettaz. $\langle p_x \rangle = \hbar k |A|^2 - \hbar k |B|^2$



- $\Psi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ è autoPanz. di \hat{k} , ma non di \hat{p}
- tuttavia Ae^{ikx} e Be^{-ikx} preso singolarmente sono autoPanz. sia di \hat{k} e \hat{p}

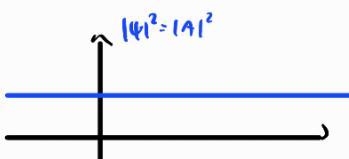
$$\frac{p^2}{2m} = k \Rightarrow p = \pm \sqrt{2km}$$

se ho una componente progressiva e regressiva non so quale segno prendere $\Rightarrow p$ non è più perf. determinato

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

considero $\Psi = Ae^{ikx}$ ($\Delta p = \emptyset$)

Si trova infatti $\Delta x \rightarrow \infty$:



- La prob. di trovare la partecella in una det. posiz. è distribuita equiprobabilmente sull'asse x , cioè la puntata si potrebbe trovare in qualsiasi punto con la stessa prob.

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} |A|^2 dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx = ? \quad \text{l'onda plana } (Ae^{ikx}) \text{ non è normalizzabile}$$

- mi convinto dicendo che un domino $(-\infty, +\infty)$ nella realtà?

$\Rightarrow [-\ell, \ell]$ con ℓ grande o piccolo, ma non ∞

$$\Rightarrow \int_{-\ell}^{\ell} |A|^2 dx \Rightarrow |A| = \frac{1}{\sqrt{2\ell}}$$

$$J = \frac{\hbar}{2m} \cdot \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right) = \frac{\hbar}{2m} \cdot \left\{ A e^{-ikx} \cdot ik A e^{ikx} - A e^{ikx} \cdot (-ik A e^{-ikx}) \right\}$$

$$= \frac{\hbar}{2m} \left\{ ik |A|^2 + ik |A|^2 \right\}$$

$$= \frac{\hbar k}{m} |A|^2$$

$$= \frac{p}{m} |\mathbf{A}|^2$$

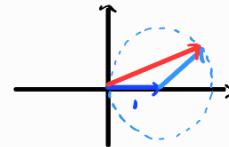
$$v_g |\mathbf{A}|^2 \quad v_g = \frac{p}{m} \quad \text{velocità di frangimento}$$

considero un "pacchetto" di 2 armi che:

$$\Psi(x, t) = e^{i(kx - \omega t)} + e^{i[(k + \Delta k)x - (\omega + \Delta \omega)t]}$$

$$= e^{i(kx - \omega t)} \cdot [1 + e^{i\Delta k(x - \frac{\Delta \omega}{\Delta k}t)}]$$

$$|\Psi|^2 \text{ dipende dal tempo: } |1 + e^{i\Delta k(x - \frac{\Delta \omega}{\Delta k}t)}|^2$$



è max. quando $e^{i\Delta k(x - \frac{\Delta \omega}{\Delta k}t)} // 1$

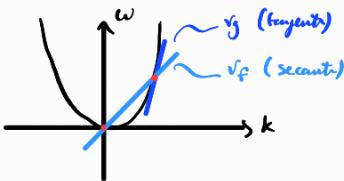
$$\Rightarrow \Delta k(x - \frac{\Delta \omega}{\Delta k}t) = \phi \Rightarrow x = \frac{\Delta \omega}{\Delta k}t \Rightarrow x = v_g t$$

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} \quad \text{velocità di frangimento}$$

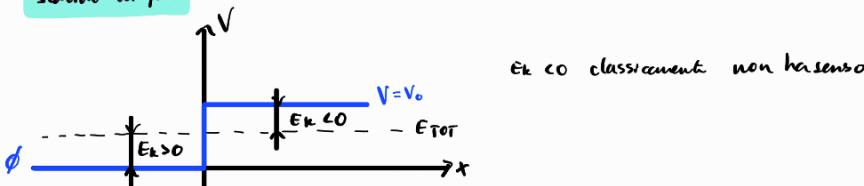
$$\omega = E/\hbar \Rightarrow \omega = \frac{\hbar k^2}{2m} \quad \text{velocità di dispersione}$$

$$k = \frac{\sqrt{2me}}{\hbar}$$

$$\Rightarrow v_g = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m} \quad \text{giustifica la def. che avevamo trovato precedentemente: } J = v_g |\mathbf{A}|^2$$



scattino di pot.



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

$$E_{\text{tot}} = E_k & \text{ per } V = \phi \\ \text{ma } V = \phi &$$

onde viaggianti:

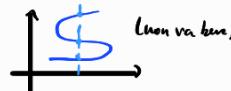
$$\text{considero } \Psi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad \text{per } k \neq 0$$

$$x > 0 \Rightarrow \frac{d^2\Psi}{dx^2} = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} \cdot \Psi = \alpha^2 \Psi \Rightarrow \Psi(x) = C e^{\alpha x} + D e^{-\alpha x}$$

$\alpha = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$

a reale

- (I) finita
- (II) deve essere una funz.
- (III) continua
- (IV) densità continua (senza il flusso potrebbe avere discontinuità)



condizioni accettabilità di Ψ :

(I) finita

(II) deve essere una funz.

(III) continua

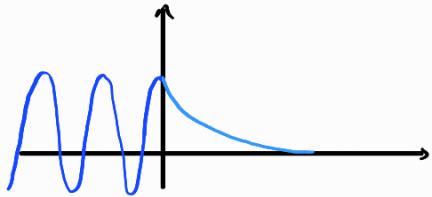
(IV) densità continua (senza il flusso potrebbe avere discontinuità)

$$\Rightarrow \begin{cases} \Psi(0^-) = \Psi(0^+) \\ \frac{d\Psi}{dx} \Big|_{0^-} = \frac{d\Psi}{dx} \Big|_{0^+} \end{cases} \quad \begin{cases} A + B = 0 \\ i\hbar A - i\hbar B = -\alpha D \end{cases}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} A = \frac{k+i\alpha}{2k} D \\ B = \frac{k-i\alpha}{2k} D \end{cases}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \Psi(x) = D \frac{k+i\alpha}{2k} e^{ikx} + D \frac{k-i\alpha}{2k} e^{-ikx} & (x>0) \quad \text{onde maggiorante} \\ \Psi(x) = D e^{-\alpha x} & (x>0) \quad \text{onde crescente} \end{cases}$$

• D numero indeterminato!

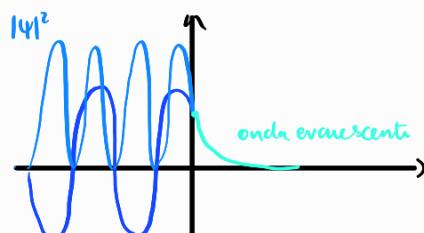


CASO $V_0 > E$



$$\text{regione classicamente proibita: } E_k = E - V < 0$$

tuttavia per effetto tunnel:



$\text{Re}[\psi]$ (o $\text{Im}[\psi]$)

$$\Rightarrow J^+ = \frac{\hbar k}{m} \left| \frac{k+i\alpha}{2k} D \right|^2 \rightarrow \text{flusso incidente}$$

$$\Rightarrow J^- = \frac{\hbar k}{m} \left| \frac{k-i\alpha}{2k} D \right|^2 \leftarrow \text{flusso riflesso}$$

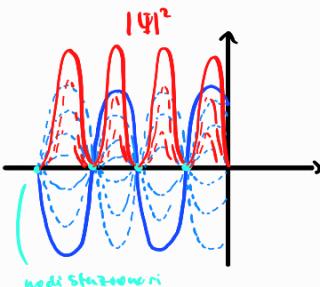
$$\frac{\hbar k}{m} \left| \frac{k+i\alpha}{2k} D \right|^2 = \frac{\hbar k}{m} \left| \frac{k-i\alpha}{2k} D \right|^2$$

$$\Rightarrow |k+i\alpha|^2 = |k-i\alpha|^2$$

$$\Rightarrow \underbrace{k^2 + \alpha^2}_{\text{Re}^2} = \underbrace{k^2 + \alpha^2}_{\text{Im}^2} \quad \text{quindi effettivamente il flusso incidente} = \text{flusso riflesso}$$

$$\begin{aligned} \psi &= \frac{k+i\alpha}{2k} D e^{ikx} + \frac{k-i\alpha}{2k} D e^{-ikx} \\ &= \underbrace{\frac{D}{2} (e^{ikx} + e^{-ikx})}_{\text{Re}[\psi]} + i \underbrace{\frac{\hbar}{2m} D (e^{ikx} - e^{-ikx})}_{\text{Im}[\psi]} \\ &= D \cos(kx) - \frac{\hbar}{k} D \sin(kx) \end{aligned}$$

↪ ψ è reale! Ed è anche staz. (combinaz. di seni e coseni)



$$\Psi(r, t) = \psi(x) \cdot e^{-i\omega t} \quad \text{è un'onda che oscilla nel tempo, ma non raggira} \Rightarrow |\Psi|^2 \text{ mi dà la probabilità}$$

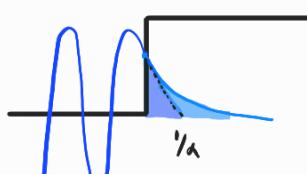
- nei max.: interf. costruttiva (tra onda progressiva e regressiva cioè tra onda incidente e riflessa)
↳ prob. max. di trovare la particella in quella pos.

- nei min.: interf. distruttiva
↳ prob. = 0

⇒ la particella si sta comportando da onda

considero un'indeterminaz. nell'ordine di k :

$$\Rightarrow \Delta p \cdot \Delta x = \hbar$$



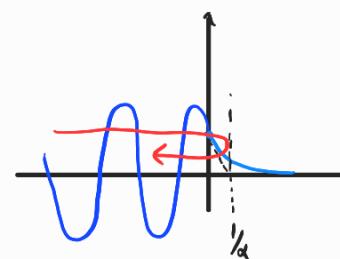
vedo $1/\lambda$ come una indeterminaz. nella posiz.

↳ distingue due zone in cui è più o meno probabile trovare la particella

$$\Rightarrow \Delta p \cdot \frac{1}{\lambda} = \hbar \Rightarrow \Delta p = \frac{\hbar \cdot k}{\lambda} \quad (\lambda = \sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar}})$$

$$x < 0: \quad \psi(x) = \underbrace{\frac{k+i\alpha}{2k} D e^{ikx}}_{\text{onda progressiva}} + \underbrace{\frac{k-i\alpha}{2k} D e^{-ikx}}_{\text{onda regressiva}} \quad \text{onda viaggiante}$$

$$x > 0: \quad \psi(x) = D e^{-\alpha x} = D e^{-\frac{1}{\lambda} x} \quad \text{onda evanescente}$$



- Se $J^+ = J^-$ vuol dire che prima e poi tutte le particelle riflettono indietro. Tuttavia si vede so che l'onda penetra un po' oltre $x=0$ (onda evanescente) possiamo interpretare la cosa come se l'onda incidente stesse riflettendo in $x=1/\lambda$ e non in $x=0$, così viene tutto riflesso, ma irradia in zona $x>0$

$$\Rightarrow \Delta E_K = \frac{\hbar^2}{2m} = V_0 - E \text{ incremento sull'energia cinetica}$$

$E_K = E - V_0$ classicamente era $\neq 0$ e quindi era impossibile trovare la particella nella zona $x > 0$. Tuttavia consideriamo che E_K è afflitto da indeterminaz.: $E_K + \Delta E_K$ può essere ~ 0 quindi possono entrare giusti (con velocità nulla in questo caso) nella zona $x > 0$

Caso $V_0 < E$

$$\Rightarrow \Psi = e^{ikx} + R e^{-ikx} \quad (x < 0)$$

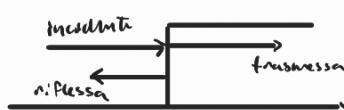
$$\text{per } x > 0: -\frac{\hbar^2}{2m} \Psi^2 + V_0 \Psi = E \Psi \rightarrow \frac{\hbar^2}{2m} \Psi^2 + (E - V_0) \Psi = 0$$

$$\Rightarrow \frac{d^2 \Psi}{dx^2} + k'^2 \Psi = 0$$

La sol. è sempre un'onda incipiente ma con wavelet.
d'onda puri a k' (è cambiata E_K) $\Rightarrow k' = \sqrt{2m(E-V_0)}/\hbar$

$$\Rightarrow \Psi = T e^{ikx} + A e^{-ik'x} \Rightarrow \Psi = T e^{ikx}$$

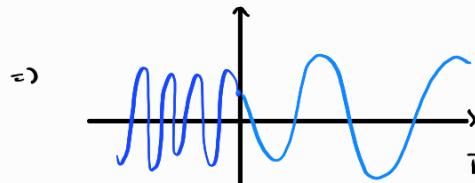
non può esistere
una onda "riflessa"
riflessione nel secondo
mezzo, non ha senso



condiz. al contorno:

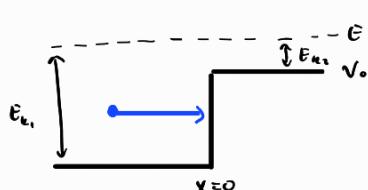
$$\begin{cases} 1+R=T \\ ik - ikR = ik'T \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} 1+R=T \\ 1-R = \frac{k'}{k} T \end{cases} \Rightarrow T = \left(1 + \frac{k'}{k}\right) T \Rightarrow T = \frac{2}{\left(1 + \frac{k'}{k}\right)} = \frac{2k}{k+k'}.$$

$$\Rightarrow \begin{cases} T = \frac{2k}{k+k'} \\ R = \frac{k-k'}{k+k'} \end{cases}$$



$R \neq 1$, l'onda incidente e riflessa non hanno più lo stesso modulo
La l'onda risultante non è puremente sinusoidale

T potrebbe essere > 1
L'onda è cambiata il medesimo



classicamente: la particella compiendente oltrepassa la barriera con una nuova E_K minore

particella quantistica: si comporta da onda, può essere riflessa e trasmessa

$$J_i = \frac{\hbar k}{m}; J_r = \frac{\hbar k}{m} |R|^2; J_t = \frac{\hbar k}{m} |T|^2$$

$$r = \frac{J_r}{J_i} = |R|^2 = \left(\frac{k-k'}{k+k'}\right)^2 \text{ prob. di riflessione}$$

$$t = \frac{J_t}{J_i} = |T|^2 = \left(\frac{4kk'}{k+k'}\right)^2 \text{ prob. di trasmissione}$$

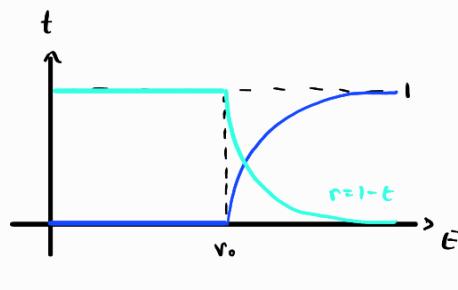
notai: r, R, t, T sono tutti riferiti a onde incipienti. L'onda evanescente non è incipiente, non è considerata in questi coeff.

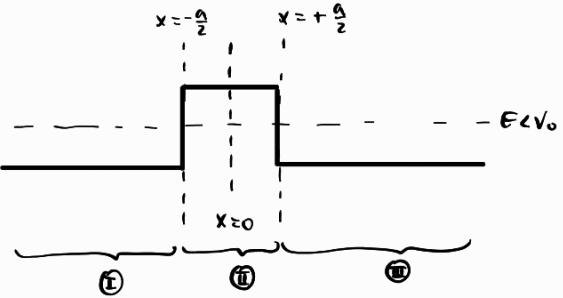
$$r+t=1$$

rispetto a t :

$$t = \frac{4}{\frac{k'}{k} + \frac{k}{k'} + 2} = \frac{4}{\sqrt{\frac{E}{E-V_0}} + \sqrt{\frac{E-V_0}{E}} + 2}$$

$$\begin{cases} k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \\ k' = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar} \end{cases}$$





$$\textcircled{I} \quad \Psi = e^{ikx} + Re^{-ikx} \quad (k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}})$$

$$\textcircled{II} \quad \Psi = Ae^{\alpha x} + Be^{-\alpha x} \quad (\alpha = \sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}})$$

$$\textcircled{III} \quad \Psi = Te^{ikx} \quad (k = \sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}})$$

$$\left\{ e^{-ik\frac{a}{2}} + Re^{ik\frac{a}{2}} = Ae^{-\alpha\frac{a}{2}} + Be^{\alpha\frac{a}{2}} \quad (\text{continuità in } x = -\frac{a}{2}) \right.$$

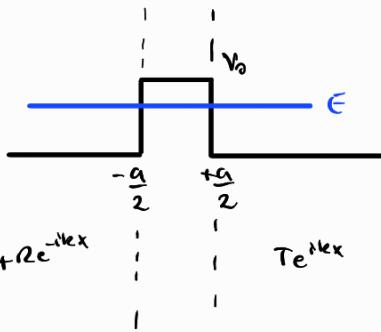
$$\left. ik e^{-ik\frac{a}{2}} - ikRe^{ik\frac{a}{2}} = \alpha Ae^{-\alpha\frac{a}{2}} - \alpha Be^{\alpha\frac{a}{2}} \quad (\text{continuità derivate in } x = -\frac{a}{2}) \right.$$

$$\left\{ Ae^{\alpha\frac{a}{2}} + Be^{-\alpha\frac{a}{2}} = Te^{ik\frac{a}{2}} \quad (\text{continuità in } x = \frac{a}{2}) \right.$$

$$\left. \alpha Ae^{\alpha\frac{a}{2}} - \alpha Be^{-\alpha\frac{a}{2}} = ikTe^{ik\frac{a}{2}} \quad (\text{continuità derivate in } x = \frac{a}{2}) \right.$$

risolvendo il sistema trovo:

$$T = \frac{-i2k\frac{1}{\alpha}e^{-ik\alpha}}{(1-\frac{k^2}{\alpha^2})\sinh(\alpha) - i2k\frac{1}{\alpha}\cosh(\alpha)}$$



$$T = \frac{-2 \cdot i \frac{k}{\alpha} e^{-ik\alpha}}{\left(1 - \frac{k^2}{\alpha^2}\right) \operatorname{sh}(\alpha\alpha) - 2i \frac{k}{\alpha} \operatorname{ch}(\alpha\alpha)} \quad \text{con } \alpha = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{k}}$$

$$j_i = \frac{ik}{m}; \quad j_t = \frac{ik}{m} |T|^2$$

$$\Rightarrow |T|^2 = \frac{4 \frac{k^2}{\alpha^2}}{\left(1 - \frac{k^2}{\alpha^2}\right)^2 \operatorname{sh}^2(\alpha\alpha) + 4 \frac{k^2}{\alpha^2} \operatorname{ch}^2(\alpha\alpha)} = \frac{1}{\frac{\left(1 - \frac{k^2}{\alpha^2}\right)^2 \operatorname{sh}^2(\alpha\alpha) + 1 + \operatorname{sh}^2(\alpha\alpha)}{4 \frac{k^2}{\alpha^2}}} = \frac{1}{\operatorname{sh}^2(\alpha\alpha) \left[\left(\frac{1 - \frac{k^2}{\alpha^2}}{2 \frac{k}{\alpha}} \right)^2 + 1 \right] + 1}$$

$$\operatorname{ch}^2 x - \operatorname{sh}^2 x = 1 \\ \Rightarrow \operatorname{ch}^2 x = 1 + \operatorname{sh}^2 x$$

$$\Rightarrow |T|^2 = \frac{1}{1 + \left(\frac{1 + \frac{k^2}{\alpha^2}}{2 \frac{k}{\alpha}} \right)^2 \operatorname{sh}^2(\alpha\alpha)}$$

$\sim \left(\frac{4\alpha k}{k^2 + \alpha^2} \right)^2 e^{-2\alpha\alpha} \sim e^{-2\alpha\alpha} \ll 1 \text{ per } (\alpha\alpha \gg 1)$
 per $\alpha\alpha \gg 1$
 (basta anche $\alpha\alpha = 2, 3$)
 $\Rightarrow |T|^2 = e^{-2\alpha\alpha}$

$$\begin{aligned} \left(\frac{1 - \frac{k^2}{\alpha^2}}{2 \frac{k}{\alpha}} \right)^2 + 1 &= 1 + \left(\frac{k^2}{\alpha^2} \right)^2 - 2 \frac{k^2}{\alpha^2} + 4 \frac{k^2}{\alpha^2} \\ &= \frac{1 + \left(\frac{k^2}{\alpha^2} \right)^2 + 2 \frac{k^2}{\alpha^2}}{4 \frac{k^2}{\alpha^2}} = \left(\frac{1 + \frac{k^2}{\alpha^2}}{2 \frac{k}{\alpha}} \right)^2 \end{aligned}$$

$$\operatorname{sh} x = \frac{e^x - e^{-x}}{2}$$

se $x \gg 1$, il termine e^{-x} rispetto e^x è trascurabile

per $\alpha\alpha \gg 1$ e quindi $e^{-2\alpha\alpha}$ avremo che $|T|^2$ (una prob.) è molto piccola. Trascureremo quindi il coeff. $\left(\frac{4\alpha k}{k^2 + \alpha^2} \right)^2$ perché alla fine mi basterà sapere l'ordine di grandezza di $|T|^2$

$$\Rightarrow \frac{1}{1 + \left(\frac{k^2 + \alpha^2}{2 k \alpha} \right)^2 \cdot \frac{1}{4} e^{-2\alpha\alpha}}$$

↑ lo trascureremo

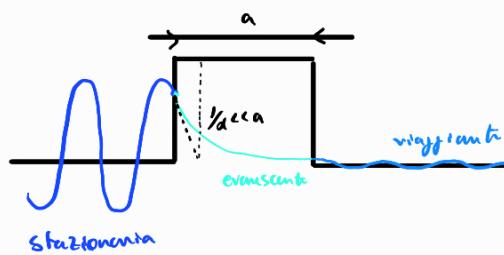
$$\alpha \gg 1 \Rightarrow \alpha \gg 1/a$$

implica avere α grande

$$\hookrightarrow \alpha = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

$\Rightarrow V_0 - E$ grande

$\Rightarrow V_0 \gg E$



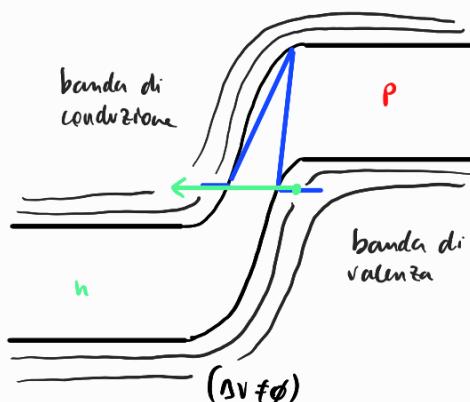
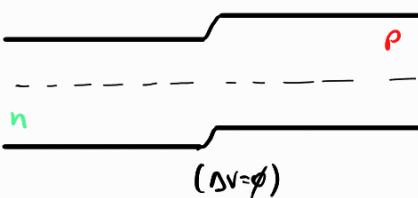
- cioè se l'energia della particella è < V_0 , avrà poca prob. di avere un'onda maggiorante trasmessa, tradotto nel fatto che $1/\alpha \ll a$ cioè l'onda evanescente si attenua molto velocemente

$$|T|^2 + |R|^2 = 1$$

$$|R|^2 = 1 - |T|^2 \approx 1 \quad \text{per } \alpha \gg 1$$

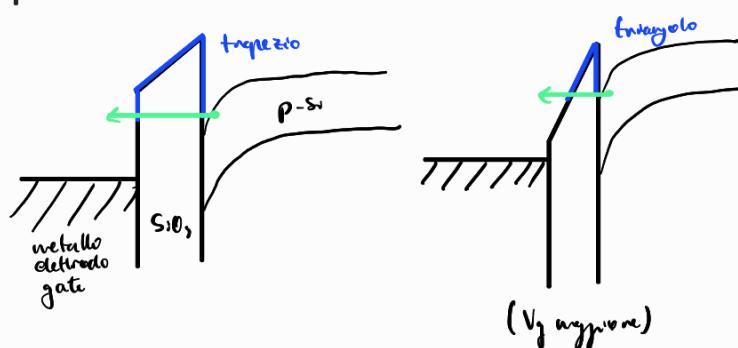
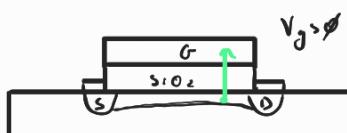
tunneling per profili di potenziale generici

grazie a np



- un elettrone che vuole fare tunneling da banda di valenza a banda di conduzione vede uno scalino di potenziale "trapezio"

MOSFET



- per via del tunneling avrà della corrente di leakpage all'elettrodo di gati \Rightarrow consumo potenze strate

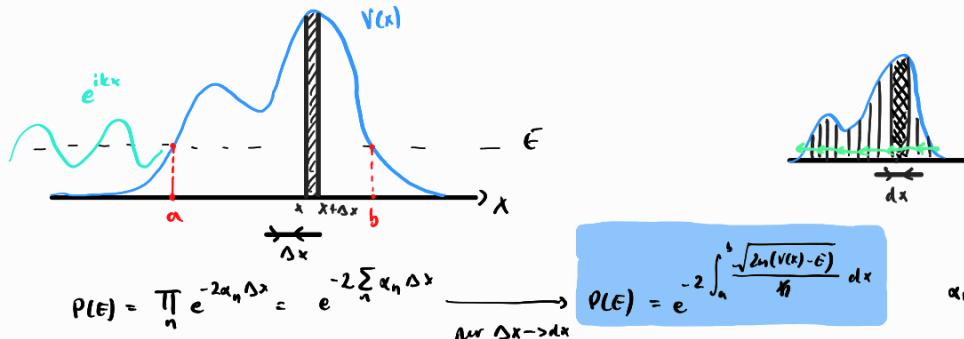
- voglio avere uno spessore maggiore di ossido pur evitare il tunneling. Tuttavia questo comporta che la capacità sia minore

\hookrightarrow si usa ossido high-k ($HfO_2, HfSiON$)
 $\epsilon_r = k \gg \epsilon_{SiO_2}$

$$C = \epsilon \frac{A}{d} \quad \text{posso compenetrare la dim. di } C \text{ dividendo all'inc. di } d \text{ con una } \epsilon \text{ maggiore}$$

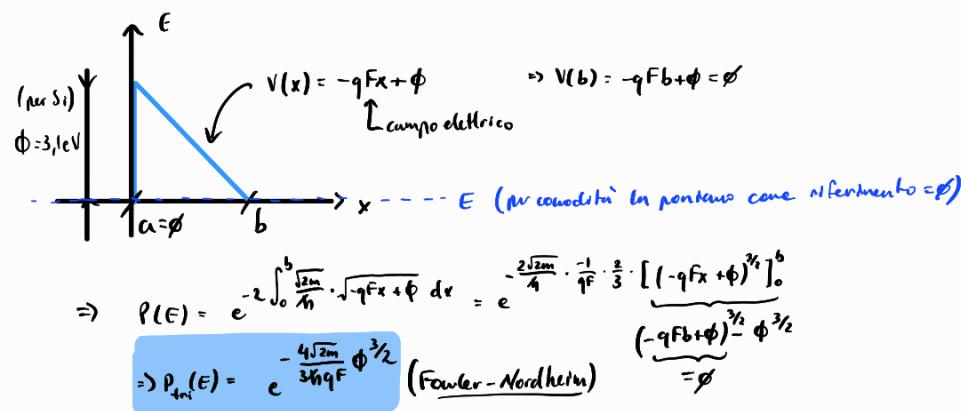
- nel caso di profili di pot. del HZO $V(x) = A + Bx$ la sol. dell'eq. di Schrödinger è una funt. di Airy

approssimazione WKB (Wentzel-Brillouin-Kramers)

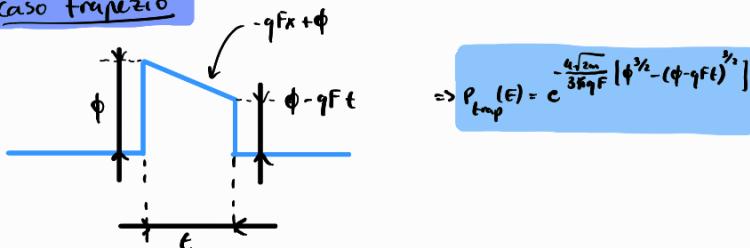


stiamo dicendo che la prob. che l'elettrone
vada attraverso da $a \rightarrow b$ è la prob.
che oltrepassi tutti gli ostacoli di pot. di
larghezza Δx

Caso triangolare

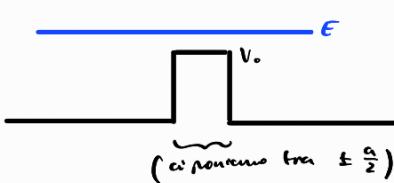


Caso trapezio



caso $E > V_0$

per $E > V_0$:



$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

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

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V_0 \psi = E \psi \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + (V_0 - E) \psi = 0$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} p^2 + (V_0 - E) = 0 \Rightarrow p^2 = \frac{(E - V_0) \cdot 2m}{\hbar^2} \Rightarrow p = \pm i \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}} \Rightarrow \psi = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$$

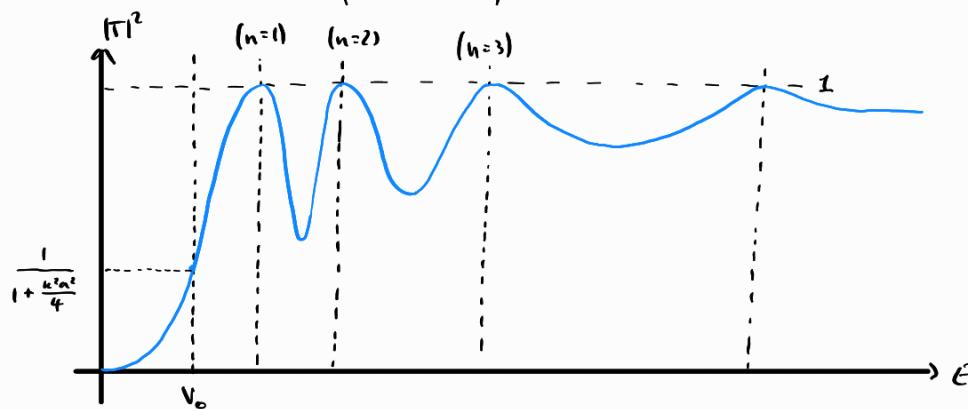
$$\text{nel caso } V_0 > E \text{ si avrà: } \psi = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$$

basta prendere $k = ik/a$ e "ritagliare" i risultati già trovati precedentemente:

$$\Rightarrow |T|^2 = \frac{1}{1 + \left(\frac{k^2 - k'^2}{2ik\alpha}\right)^2 \sin^2(ik\alpha)} = \frac{1}{1 + \left(\frac{k^2 - k'^2}{2ik\alpha}\right)^2 (\sin(k\alpha))^2} \Rightarrow |T|^2 = \frac{1}{1 + \left(\frac{1 - \left(\frac{k'}{k}\right)^2}{2\frac{k'}{k}}\right)^2 \sin^2(k\alpha)}$$

$(\sin(ix) = i \sin x)$

k' è funz. di E , dunque
 $|T|^2$ è funz. di E



max. per $\sin^2(k\alpha) = 1$

$$\Rightarrow k\alpha = n\pi \text{ con } n \in \mathbb{N}$$

$$\Rightarrow k' = \frac{n\pi}{a} \Rightarrow \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar} = \frac{n\pi}{a}$$

$$\Rightarrow E = V_0 + \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{a^2 \cdot 2m} \cdot \frac{4}{9} \quad (k = \frac{\hbar}{2a})$$

$$= V_0 + n^2 \cdot \frac{\hbar^2}{8ma^2}$$

$\propto n^2$

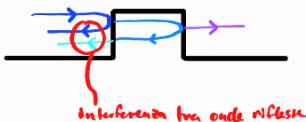
$$\text{per } E \rightarrow V_0 \Rightarrow k' \rightarrow 0 \Rightarrow \sin(k\alpha) \sim k\alpha \Rightarrow |T|^2 \sim \frac{1}{1 + \frac{k^2}{4} \cdot \frac{k'^2 a^2}{k^2}} = \frac{1}{1 + \frac{k^2 a^2}{4}}$$

posso interpretare questi picchi dove $|T|^2 = 1$ in modi diversi:

- 1) $k' = \frac{2\pi}{\lambda'} = n \frac{\pi}{a} \Rightarrow a = n \frac{\lambda'}{2}$ risonanze dell'onda staz.
(cioè sono le freq. ammesse, i modi della corda vibrante)

↳ la particella è in risonanza con la barriera

2)



ha interferenza distruttiva tra le onde riflesse \Rightarrow non ha componenti regressive di onde riflesse
↳ viene trasversa tutta ($|T|^2 = 1$)

$$\Psi(x,t) = \Psi(x)e^{-i\omega t} = \Psi(x)e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \quad \text{stato stazionario}$$

$$\Psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \Psi_n e^{-i\omega_n t} \quad \text{stato non stazionario}$$

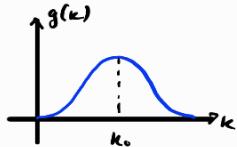
$$\forall \epsilon \neq 0 \Rightarrow \Psi(x,t) = \int e^{i(kx-\omega t)} \cdot g(k) dk \quad \text{è una convoluzione}$$

" a_n " è lo spettro
(trasf. di Fourier) delle auto fure.

più a è grande più è stretta

$$\text{convoluzione } g(k) = e^{-\alpha(k-k_0)^2} \quad (\text{gaussiana})$$

(non è il k' dipende)



$$\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik'x} \cdot e^{i\omega t} \cdot dk' = e^{ik_0 x} \int e^{-\alpha(k'-k_0)^2} \cdot e^{i\omega t} = e^{ik_0 x} \cdot e^{-\alpha \left(x^2 - \frac{i\omega t}{\alpha} + \left(\frac{ix}{\alpha} \right)^2 \right)} dk'$$

sotto e appoggio all'esponente $\left(\frac{ix}{\alpha} \right)^2$

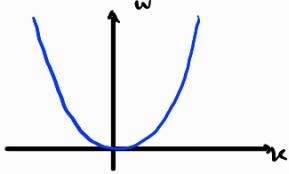
$$\Rightarrow \Psi(x,t) e^{ik_0 x} \cdot e^{-\frac{x^2}{4\alpha}} \cdot \int e^{-\alpha(k'-\frac{i\omega t}{\alpha})^2} \cdot dk' = e^{ik_0 x} \cdot e^{-\frac{x^2}{4\alpha}} \cdot \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \quad \text{è una gaussiana}$$

$\Rightarrow |\Psi(x,t)|^2$ è una gaussiana: verificiamolo

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

$$\Psi(x,t) = \int e^{-\alpha k'^2} \cdot e^{i(kx-\omega t)} dk'$$

$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$ relaz. di dispersione quadratica (potrebbe essere anche di altro tipo)



$$\Rightarrow \omega(k) \sim \underbrace{\omega(k_0)}_{\omega_0} + \frac{d\omega}{dk} \Big|_{k=k_0} \cdot (k-k_0) + \frac{1}{2} \frac{d^2\omega}{dk^2} \Big|_{k=k_0} \cdot (k-k_0)^2$$

$$\hookrightarrow \omega(k) = \omega_0 + \nu_g k' + \beta k'^2$$

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} \Big|_{k=k_0}$$

$$\left(\omega = \frac{E}{\hbar}, E = E(\omega) \right)$$

$$\beta = \frac{1}{2} \frac{d^2\omega}{dk^2} \Big|_{k=k_0}$$

$$\Rightarrow \Psi(x,t) = \int e^{-\alpha k'^2} \cdot e^{ik'x} \cdot e^{ik_0 x} \cdot e^{-i\omega t} \cdot e^{-iv_g k' t} \cdot e^{-i\beta k'^2 t} \cdot dk'$$

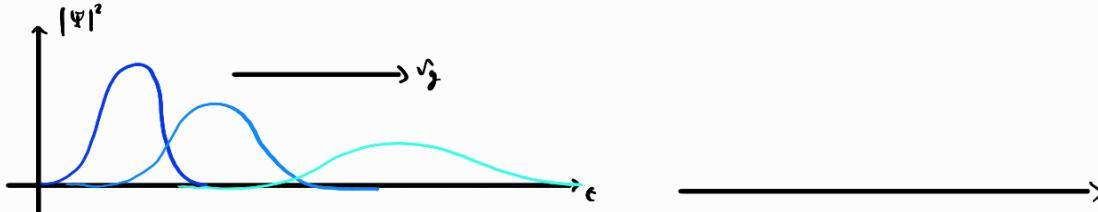
$$= e^{(ik_0 x - \omega t)} \cdot \int e^{-(\alpha + i\beta t)k'^2} \cdot e^{ik'(x - v_g t)} dk'$$

$$\Rightarrow \Psi(x,t) = e^{i(k_0 x - \omega t)} \cdot e^{-\frac{(x - v_g t)^2}{4(\alpha + i\beta t)}} \cdot \sqrt{\frac{\pi}{\alpha + i\beta t}}$$

effetto di dispersione col tempo: si allunga col tempo (in Gaussiana)

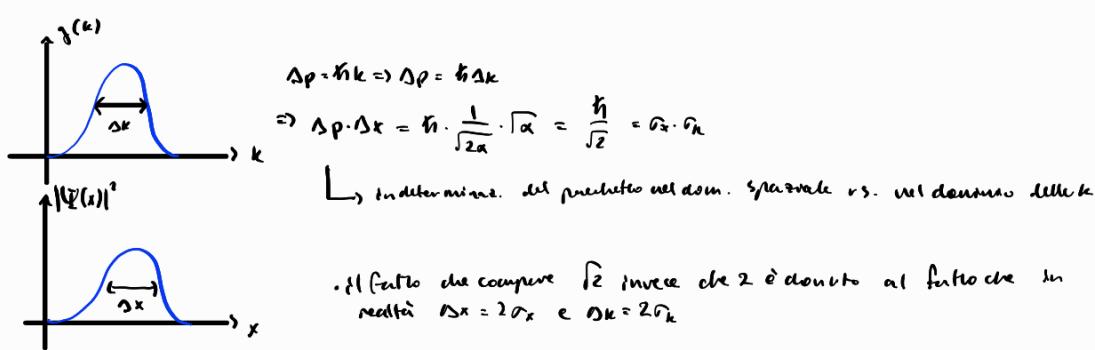
(uso il risultato già trovato prima ponendo $x \leftarrow x - v_g t$, $\alpha \leftarrow \alpha + i\beta t$)

il max. della gaussiana è in $x - v_g t + \omega t \Rightarrow x = v_g t$ (che era da

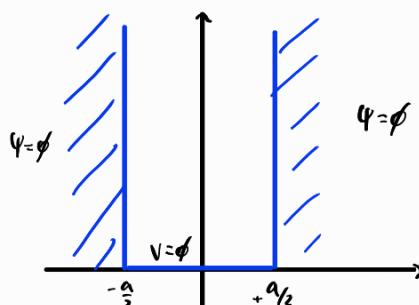


$$|\Psi|^2 = \Psi \cdot \Psi^* = e^{-\frac{(x - v_g t)^2}{4(\alpha + i\beta t)}} \cdot \sqrt{\frac{\pi}{\alpha + i\beta t}} \cdot e^{-\frac{x - v_g t}{4(\alpha + i\beta t)}} \cdot \sqrt{\frac{\pi}{\alpha + i\beta t}}$$

$$= e^{-\frac{2(x - v_g t)^2}{4(\alpha^2 + \beta^2 t^2)}} \cdot \frac{\pi}{\sqrt{\alpha^2 + \beta^2 t^2}} = e^{-\frac{(x - v_g t)^2}{2(\alpha^2 + \frac{\beta^2 t^2}{\alpha})}} \cdot \frac{\pi}{\sqrt{\alpha^2 + \beta^2 t^2}}$$



banca di potenziale a pareti so



- nella realtà non esiste
- la particella è confinata nella buca \Rightarrow problema confinato
- il tunneling non può avvenire in questi casi $\Rightarrow \Psi \neq 0$ per $|x| > \frac{a}{2}$
L_s le pareti riflettono totalmente le onde \Rightarrow danno vita a onde stazionarie all'interno della buca
- $\Rightarrow \Psi(x) = A\cos(kx) + B\sin(kx)$

$$\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m} \Psi''}_{= E\Psi}$$

condiz. al contorno: $\Psi(\pm \frac{a}{2}) = 0$ per continuità

$$\begin{cases} \Psi(-\frac{a}{2}) = 0 \Rightarrow A\cos(k\frac{a}{2}) - B\sin(k\frac{a}{2}) = 0 \\ \Psi(+\frac{a}{2}) = 0 \Rightarrow A\cos(k\frac{a}{2}) + B\sin(k\frac{a}{2}) = 0 \end{cases} \quad \text{chiamo } \cos(k\frac{a}{2}) = X \text{ e } \sin(k\frac{a}{2}) = Y$$

$$\Rightarrow \begin{cases} Ax - By = 0 \\ Ax + By = 0 \end{cases} \Rightarrow 2By = 0 \Rightarrow B = 0$$

$\Rightarrow \Psi(x) = A\cos(k\frac{a}{2}) = 0 \Rightarrow A \neq 0$ seno (la particella non c'è, non mi interessa)

$\Rightarrow \cos(k\frac{a}{2}) = 0 \Leftrightarrow k\frac{a}{2} = (2n+1)\frac{\pi}{2} \text{ near}$

$$\hookrightarrow a = (2n+1)\frac{\lambda}{2} \quad n \in \mathbb{N} \quad (\text{è la solita condizione di onde stazionarie})$$

(a è un numero di semi lunghezze d'onda)

questo era il primo caso per $A \neq 0, B = 0$. Vediamo il secondo caso $A = 0, B \neq 0$:

$$\Rightarrow \Psi = B\sin(kx) \text{ dispari}$$

$$\Rightarrow \sin(k\frac{a}{2}) = 0 \Leftrightarrow k\frac{a}{2} = n\pi \Rightarrow a = 2n \cdot \frac{\lambda}{2} \quad n \in \mathbb{N} - \{0\} \quad (\text{a è un numero di semi lunghezze d'onda})$$

caso normale

quindi abbiamo trovato le auto funz.

vediamo gli autovalori (E)

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad k = \frac{\pi}{a} (2n+1) \quad \vee \quad k = \frac{\pi}{a} 2n$$

le uniche in una mica condizione $\Rightarrow k = \frac{\pi}{a} n$

se n pari: Ψ dispari
se n dispari: Ψ pari

$$\Rightarrow E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \cdot 4\pi^2 \cdot n^2}{2m \cdot 4a^2} = E = \frac{\hbar^2}{8ma^2} \cdot n^2$$

n numero quantico

$$\begin{aligned} \Psi_1 &= A_1 \cos(k_1 x) & n=1 & \text{primo stato fondamentale} \\ \Psi_2 &= A_2 \sin(k_2 x) & n=2 & \text{secondo stato fondamentale} \end{aligned}$$

$$\vdots$$

*n pari, 4 disp.
n dispari, 4 pari*

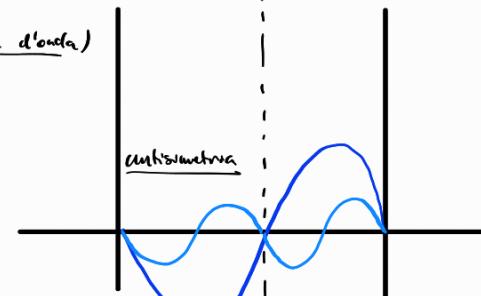
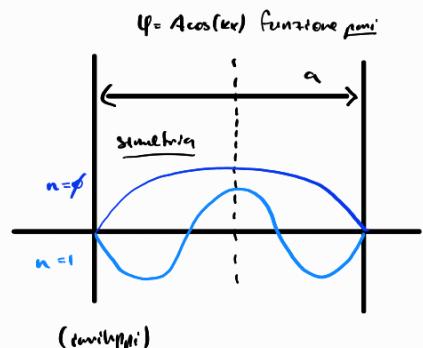
$$E_4 = 16E_1 \quad (n=4)$$

$$E_3 = 9E_1 \quad (n=3)$$

$$E_2 = 4E_1 \quad (n=2)$$

$$E_1 = \frac{\hbar^2}{8ma^2} \quad (n=1)$$

$\bullet E \neq 0 \quad \forall n \in \mathbb{N} \Rightarrow$ l'elettrone non può stare fermo (energia nulla)

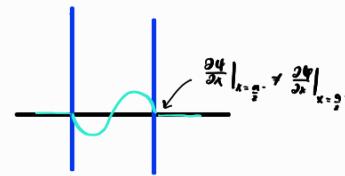


$\Psi = B\sin(kx) \text{ dispari}$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 dx = \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} A^2 \left[\frac{\cos(kx) \cdot \sin(kx) + ikx}{2} \right]^2 dx = \frac{A^2}{2} \cdot \frac{k^2}{2} = 1 \Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \quad (\text{se consideriamo } 4 \text{ disegni} \Rightarrow B = \sqrt{\frac{2}{\pi}})$$

condizione di normalizzazione
(supponiamo A reale)

$\hookrightarrow A$ è determinata nei problemi confinati



osserviamo che la continuità della derivata non potrà mai essere valida:

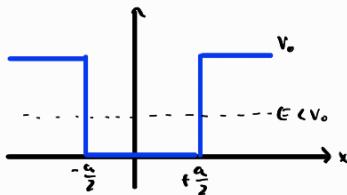
fattura questo è consentibile col fatto che il potenziale è ∞ :

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

$-\infty + \infty = \dots$

il motivo per cui non possono avere pb. anglosi (cioè la derivata prima discontinua) è perché sono le derivate seconde nell'eq. di Schrödinger scambiate \leftrightarrow ∞ . Ma se $V \rightarrow \infty$ questo è perfettamente coerente!

caso buco finito (quantum well)



per $|x| < \frac{a}{2}$ Ψ sarà sempre una funzione stazionaria, pari o dispari:

concetto di parità: $\Psi(-x) = \Psi(x)$ allora \Rightarrow

$\begin{cases} \Psi(-x) = \Psi(x) \\ \Psi(-x) = -\Psi(x) \end{cases}$

ha un potenziale simmetrico

questo perché se il pot. è simmetrico $\Rightarrow |\Psi|^2$ è simmetrico (antiteticamente ha senso, le forze in gioco sono simmetriche, la d.d.p. lo trovare in partecelle anche lo sarà). Ma allora $\Rightarrow |\Psi(-x)|^2 = |\Psi(x)|^2 \Rightarrow \Psi(x) = \pm \Psi(-x)$ quindi: Ψ $\begin{cases} \text{pari} \\ \text{dispari} \end{cases}$

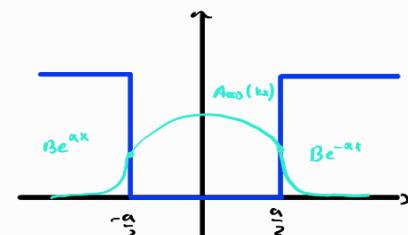
caso Ψ pari

$$|x| < \frac{a}{2} \Rightarrow \Psi = A \cos(kx)$$

\hookrightarrow impiego le condiz. al contorno \Rightarrow continuità e continuità della derivata (non ho più $V \rightarrow \infty$)

$$\begin{cases} A \cos\left(k \frac{a}{2}\right) = B e^{-ka/2} & \text{①} \\ -kA \cdot \sin\left(k \frac{a}{2}\right) = -\alpha B e^{-ka/2} & \text{②} \end{cases}$$

(per simmetria mi basta vedere le condiz. in $\frac{a}{2}$ che saranno simili a quelle in $-\frac{a}{2}$)



$$\frac{\text{①}}{\text{②}} \Rightarrow -k \tan\left(k \frac{a}{2}\right) = -\alpha \Rightarrow \tan\left(k \frac{a}{2}\right) = \frac{\alpha}{k} \quad \text{risolvendo trovo } k \quad (\text{e quindi } E \text{ perché } E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}) \quad \text{per il caso } \Psi \text{ pari}$$

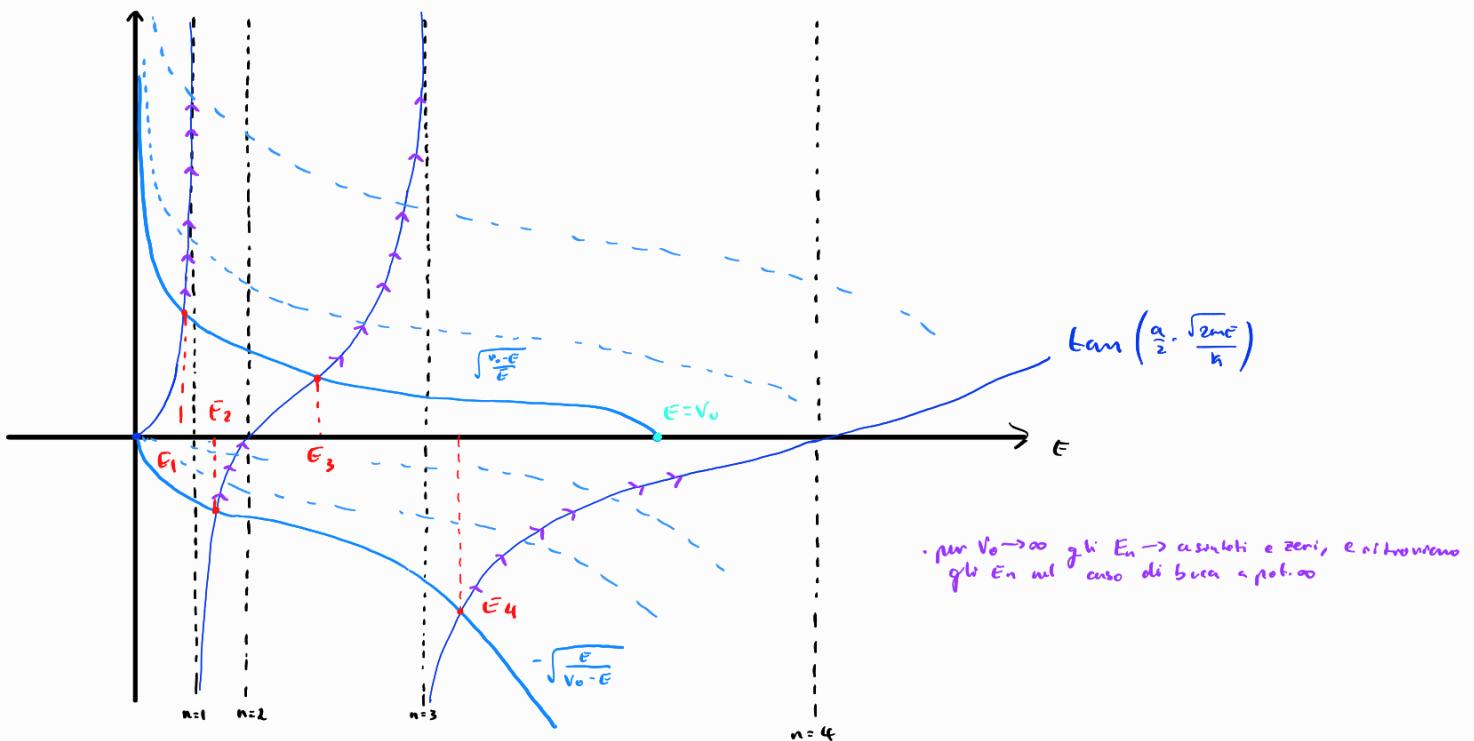
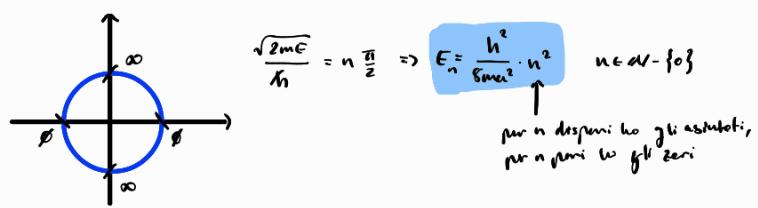
caso Ψ dispari

$$\text{otteniamo in modo analogo} \Rightarrow \tan\left(k \frac{a}{2}\right) = -\frac{\alpha}{k} \quad \text{risolvendo trovo } k \text{ (e quindi } E \text{) per } \Psi \text{ dispari}$$

fatturando queste eq. non sono risolvibili analiticamente. Risolviamo graficamente

$$\begin{cases} k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \\ \alpha = \frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar} \end{cases} \Rightarrow \underbrace{\tan\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \cdot \frac{a}{2}\right)}_{(\Psi \text{ pari})} = \sqrt{\frac{V_0-E}{E}} \quad ; \quad \underbrace{\tan\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \cdot \frac{a}{2}\right)}_{(\Psi \text{ dispari})} = -\sqrt{\frac{E}{V_0-E}}$$

troviamo gli asintoti e zeri:

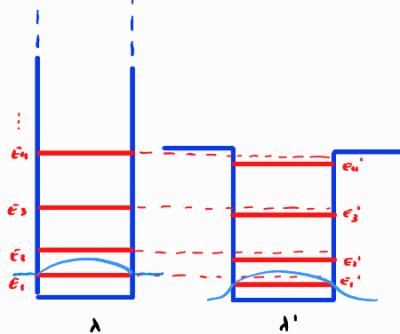


- osserviamo che a diff. del caso di quantum nelle aperture ∞ , qui ho un nuovo limite di E_n , imposto dal valore finito di V_0

• $\lambda' > \lambda$ punti Ψ si raccordano con l'exp. dell'onda evanescente

↳ ai punti di no quantico, i livelli energetici nel buco a punti fissi sono ad energia minore

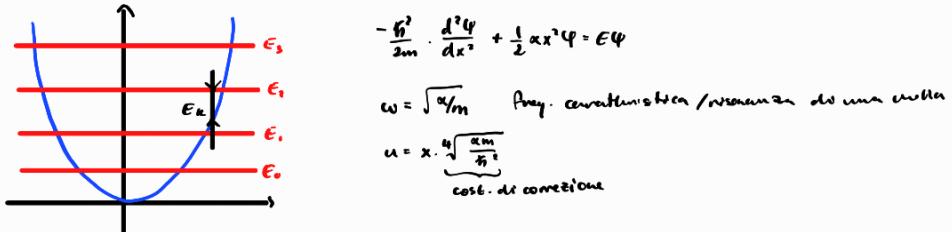
$$(E = \frac{\hbar k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2mr^2}, \text{ una } \Delta \text{ maggior corrisponde ad una energia minore})$$



oscillatore armonico

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

↑
cost. elastica



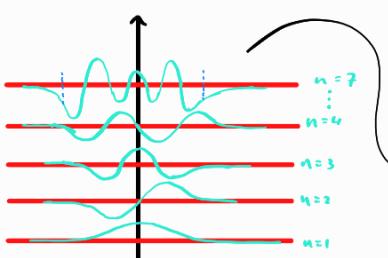
$$\Rightarrow \text{risolvendo si trova: } E_n = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \propto n, \text{ cioè } \rightarrow \text{gli autoval. sono egualmente}$$

• le diverse forme del potenziale mi determinano diverse distribuzioni di autovalori

per quanto riguarda le autofunzioni:

$$\begin{aligned} \Psi_0(u) &= A_0 e^{-u/2} \\ \Psi_1(u) &= A_1 u e^{-u/2} \\ \Psi_2(u) &= A_2 (1-2u^2) e^{-u/2} \\ \Psi_3(u) &= A_3 (3u-2u^3) e^{-u/2} \\ &\vdots \\ \Rightarrow \Psi_n(u) &= \text{polinomio di Hermite} \end{aligned}$$

noto che se allontano Ψ più e più, come d'altronde mi aspetti dato che V è simmetrico
i coeff. si det. con la condiz. di normalizzazione.



• come un oscillatore classico l'elettrone oscilla fra i due "bordi", solo che può anche invadere con una certa probabilità oltre i bordi

ma meno che un armonico sul "bordo" λ aperto (bordo inteso come st. di inserzione \Rightarrow del moto classico)

in mezzo ho E_k grande \Rightarrow il percorso interno è più grande verso i bordi. Non solo ho il più piccolo ma anche ampiezza minore (e quindi prob. minore)

↳ come in un pendolo classico, E_k è massima nel centro e quindi è lì che ha velocità max. (pensate al pendolo)

\Rightarrow come nel pendolo, l'elettrone passa più lungo negli estremi di funzione di moto e quindi ha probabilità maggiore di trovare l'elettrone

• i pt. di funzione di moto classico sono i plessi

infatti \Leftrightarrow pt. di plesso \Leftrightarrow derivate seconda nulla \Rightarrow

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

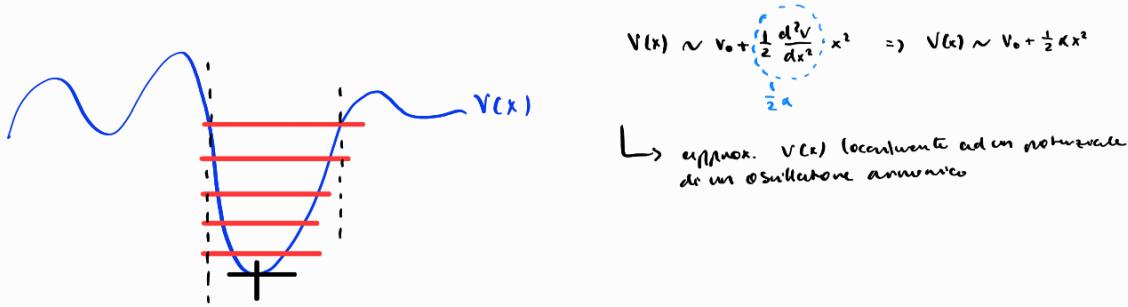
$$\Rightarrow V\Psi = E\Psi \Rightarrow \Psi(V-E) = 0$$

$\Psi = \phi \text{ (nodistaz.)}$

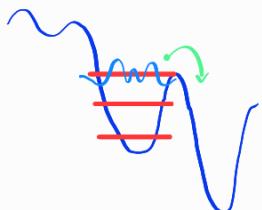
$$\underline{V=E \Rightarrow E_k=\phi}$$

$$\rho = \hbar k = \frac{n}{\lambda} \quad \text{purché } k \text{ è cost. possedet. } \lambda \text{ cost.}$$

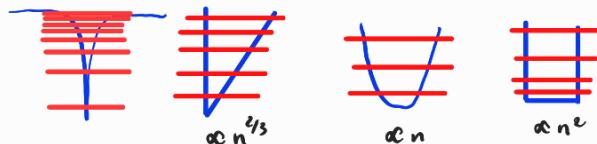
ma se k è cost. definisco λ punto per punto (λ non è più intesa come lunghezza di plesso a poco si una classe, bensì la funz. non è periodica)



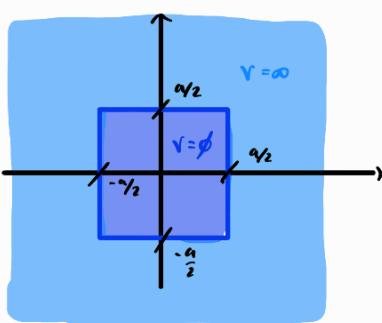
effetto di Franck - Condon



- quando aumenta l'energia non solo l'elettrone salta di livello energetico ma si sposta anche sempre più verso il fondo (come visto prima, l'elettrone tende a stare più nei bordi, e questo effetto è sempre più avvertito all'aumentare dell'energia)



caso V in 2D



$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \Psi(x, y) = E(x, y) \quad \text{per } (x, y) \in [-\frac{a}{2}, \frac{a}{2}] \times [-\frac{a}{2}, \frac{a}{2}]$$

$$\Rightarrow \Psi(x, y) = \Psi(x, y) \cdot e^{-i \frac{E}{\hbar} t}$$

$$\Rightarrow \Psi(x, y) = X(x) \cdot \Psi(y)$$

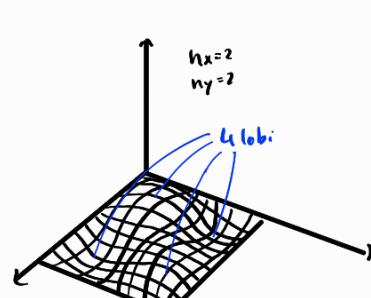
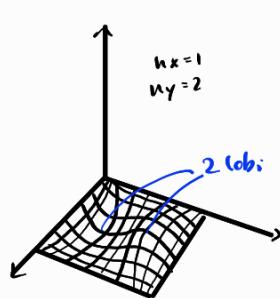
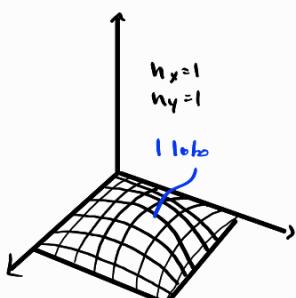
$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2 X(x)}{dx^2} y + \frac{d^2 Y(y)}{dy^2} x \right) = \frac{EX(x) \cdot Y(y)}{X(x) \cdot Y(y)}$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \underbrace{\frac{X''}{X}}_{f(x)} - \underbrace{\frac{Y''}{2m} \frac{y^2}{Y}}_{g(y)} = E \cdot \text{cost.} \Leftrightarrow f(x), g(y) \text{ sono cost.} \quad (\text{o se } V \text{ è una volta una somma di una } f(x) + g(y) \text{ e.s. } V = \underbrace{\frac{1}{2}a(x^2+y^2)}_{\text{pot. centrale bidim.}})$$

risolvendo trovo \Rightarrow

$$\begin{cases} Ex = \frac{\hbar^2}{8ma^2} \cdot n_x^2 \\ Ey = \frac{\hbar^2}{8ma^2} \cdot n_y^2 \end{cases} \Rightarrow E = \frac{\hbar^2}{8ma^2} \cdot (n_x^2 + n_y^2)$$

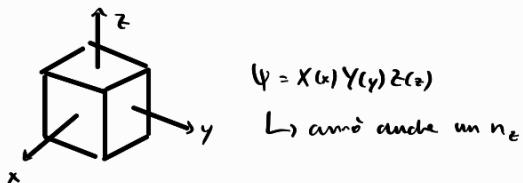
(le auto funz. invece saranno i soliti cos e sin)



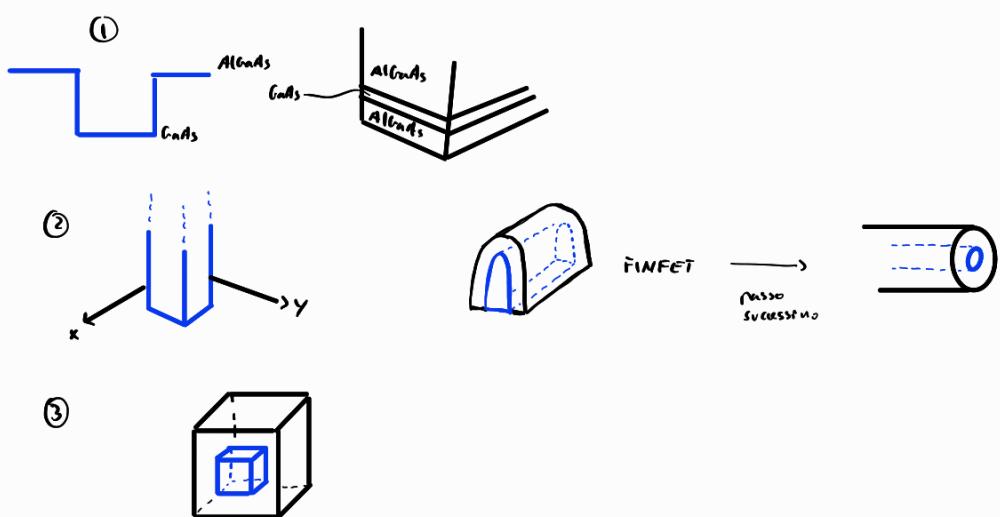
n_x	n_y	n^2	E_n
1	1	2	$\frac{\hbar^2}{2ma} \cdot 2$
2	1	5	$\frac{\hbar^2}{2ma} \cdot 5$
2	2	8	$\frac{\hbar^2}{2ma} \cdot 8$
1	3	10	\dots
3	1		

→ ho stabiliti diversi con la stessa energia (tipo $(1,2), (2,1)$) \Rightarrow degenerazione

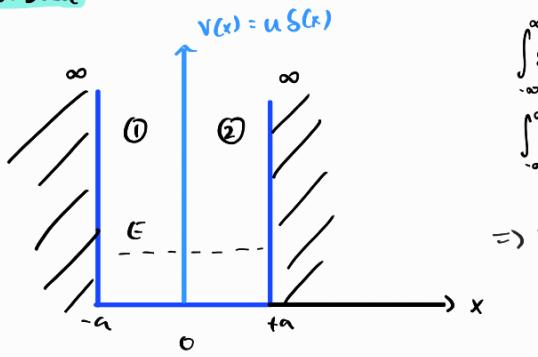
caso 3D



1D	quantum well	①
2D	quantum wire	②
3D	quantum dot	③



doppia buca



$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 1$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) f(x) dx = f(0)$$

\Rightarrow in u è contenuta l'informazione della distanza tra le buche

$$\begin{aligned} \textcircled{1} \quad \Psi_1(x) &= A_1 \cos(kx) + B_1 \sin(kx) \\ \textcircled{2} \quad \Psi_2(x) &= A_2 \cos(kx) + B_2 \sin(kx) \end{aligned}$$

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

- Il profilo di potenziale anche in questo caso è simmetrico $\Rightarrow \Psi$ dovrà essere pure o dispari.

caso 4 punti

* continuità in $x=\phi \Rightarrow \Psi_1(0) = \Psi_2(0) \Rightarrow A_1 = A_2 (=A)$

* purezza $\Rightarrow \Psi(-x) = \Psi(x) \Rightarrow \Psi_1(-x) = \Psi_2(x) \Rightarrow A_1 \cos(kx) - B_1 \sin(kx) = A_2 \cos(kx) + B_2 \sin(kx)$

$$\Leftrightarrow (B_1 + B_2) \sin(kx) = 0 \Rightarrow B_1 = -B_2 (=B)$$

e se $\sin(kx) = 0$?

$$\Rightarrow \Psi(x) = \begin{cases} \Psi_1 = A \cos(kx) - B \sin(kx) & x > 0 \\ \Psi_2 = A \cos(kx) + B \sin(kx) & x < 0 \end{cases} \quad \textcircled{1}$$

- avendo un potenziale ∞ la derivata prima potrebbe essere discontinua

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + u \delta(x) \Psi = E \Psi \quad (\text{in intorno di un intorno di } \phi : [-\varepsilon, +\varepsilon])$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} dx + u \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \delta(x) \Psi dx = E \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \Psi dx$$

faccio tendere $\varepsilon \rightarrow \phi$ e otengo :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \underbrace{\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} dx}_{+\varepsilon \rightarrow \phi \text{ da dx}} + u \underbrace{\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \delta(x) \Psi dx}_{\Psi(\phi) \text{ per def.}} = E \underbrace{\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \Psi dx}_{= \phi} \quad (\text{intorno su un intervallo nullo})$$

$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial \Psi}{\partial x} \right]_{0^-}^{0^+} + u \Psi(0) = \phi$ condizione di discontinuità della derivata prima

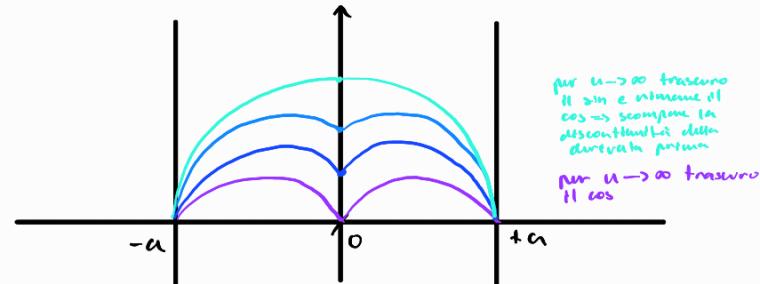
$$\Rightarrow \frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{\partial \Psi}{\partial x} \Big|_{x=0^+} - \frac{\partial \Psi}{\partial x} \Big|_{x=0^-} \right\} = u \Psi(0)$$

$$\Rightarrow \frac{\hbar^2}{2m} \left\{ -Ak \sin(k\phi^+) + Bk \cos(k\phi^+) + Ak \sin(k\phi^-) + Bk \cos(k\phi^-) \right\} = u \underbrace{\Psi(0)}_A$$

$$\Rightarrow \frac{\hbar^2}{2m} \cdot Bk = uA \Rightarrow A = \frac{\hbar^2 k}{2u}$$

$$\Rightarrow \Psi_{\text{pari}} = \begin{cases} \Psi_1 = B \left(\frac{\hbar^2 k}{2u} \cos(kx) - \sin(kx) \right) & x < 0 \\ \Psi_2 = B \left(\frac{\hbar^2 k}{2u} \cos(kx) + \sin(kx) \right) & x > 0 \end{cases}$$

(come sempre $B \approx$ può ricevere altre condit. di normalizzaz.)

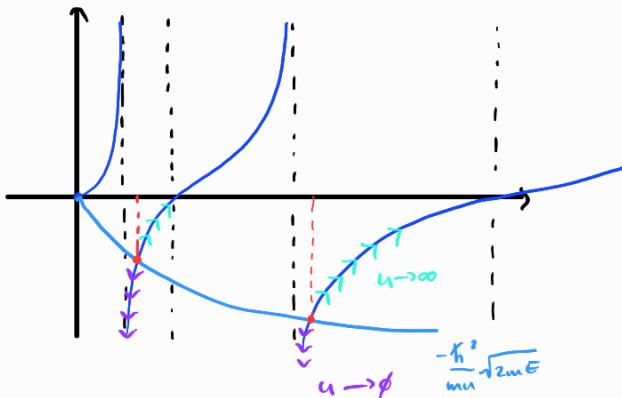


imponiamo il raccordo in $x=0$ per trovare l'autorale:

$$\Psi(+a) = \Psi(a) = \phi$$

$$\frac{\hbar^2}{m\mu} \cos(ka) + \sin(ka) = \phi \Rightarrow \tan(ka) = -\frac{\hbar^2 k}{m\mu} \Rightarrow \tan\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} a\right) = -\frac{\hbar^2}{m\mu} \sqrt{2mE}$$

zeri e asintoti della tangente per: $\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} a = n \frac{\pi}{2} \Rightarrow E_n = \frac{\hbar^2}{8m(2a)^2} \cdot n^2$ (ricorda il caso di buca di potenziale
unidim., ma con larghezza a)
 n pari \Rightarrow zeri
 n dispari \Rightarrow asintoti



per $n \rightarrow \infty$ gli autoval. tendono a quelli di Ψ_{dispari}
(come vedremo successivamente)
(autoval. \rightarrow zeri)

per $n \rightarrow \infty$ dunque al caso del buco si raggiunge con
l'ampiezza $2a$ (anche questo lo vedremo dopo)
(autoval. \rightarrow asintoti)

Caso Ψ_{dispari}

* continuità: $A_1 = A_2 (=A)$

* disparità: $\Psi_1(-x) = -\Psi_2(x) \Rightarrow A \cos(kx) - B_1 \sin(kx) = -A \cos(kx) - B_2 \sin(kx)$

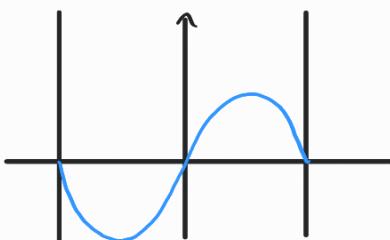
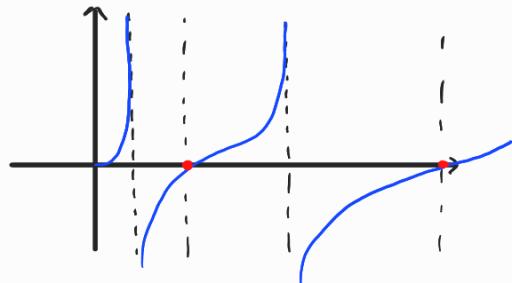
$$\hookrightarrow \text{uguali i coeff. dei sin e dei cos} \Rightarrow \begin{cases} A = -A \Rightarrow A = \phi \\ -B_1 = -B_2 \Rightarrow B_1 = B_2 (=B) \end{cases}$$

$$\Rightarrow \Psi_{\text{dispari}} = B \sin(kx)$$

tempo il raccordo:

$\Psi(+a) = \phi \Rightarrow B \sin(ka) = \phi$ è equivalente ad dire $\tan(ka) = \phi$

gli autoral. sono gli zeri della tangente. Inoltre notiamo
che non dipendono da u !!



come faccio a considerare il fatto che ho un potenziale infinito in ϕ , ma non ho discontinuità nella derivata prima?

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-L}^L \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} dx + \int_{-L}^L u \Psi dx = \int_{-L}^L E \Psi dx \Rightarrow \left. \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right|_{x=0^+} = \left. \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right|_{x=0^-} \quad \text{la derivata è continua}$$

$\underbrace{u \Psi(x)}_{\phi}$

• come già anticipato:

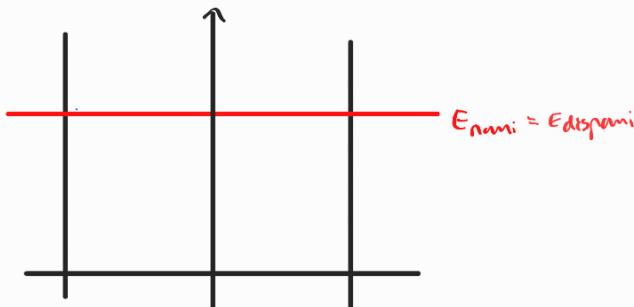
per $u \rightarrow \infty$ gli autoval. di Ψ_{pari} \rightarrow zero della tangente
autoval. di Ψ_{pari}

\Rightarrow cioè per $u \rightarrow \infty$ si ha $E_{\text{pari}} \rightarrow E_{\text{dispari}} = \frac{\hbar^2}{8m(2a)^2} n^2$ per $n \text{ pari}$
 $= \frac{\hbar^2}{8m(2a)^2} \cdot (2n)^2$ per $n \text{ odd}$

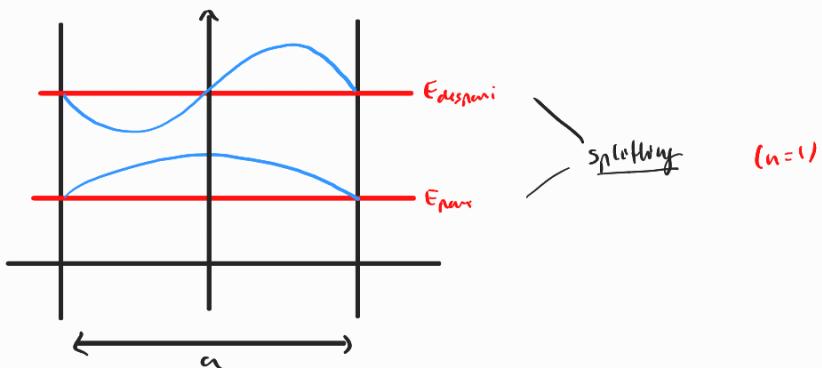
$\Rightarrow E_{\text{pari}} = E_{\text{dispari}} = \frac{\hbar^2}{8ma^2} n^2 \text{ per } n \in \mathbb{N}, \text{ per } u \rightarrow \infty$

\hookrightarrow sono gli autovettori della buca singola isolata da ampiezza a .
Le due buche diventano isolate e non interagiscono più.

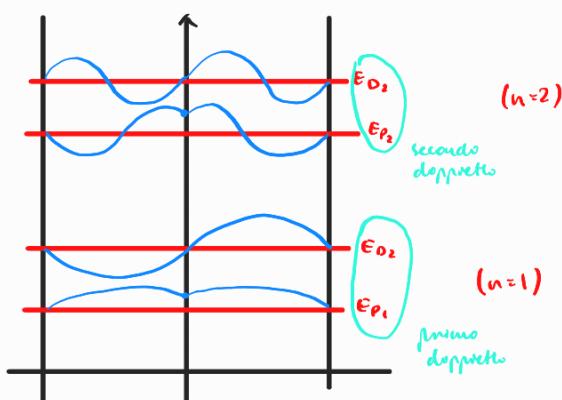
caso $u \rightarrow \infty$

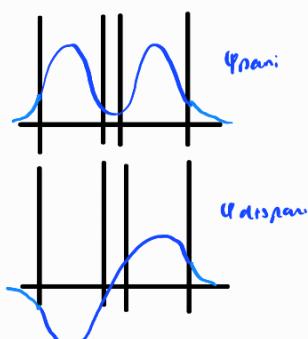
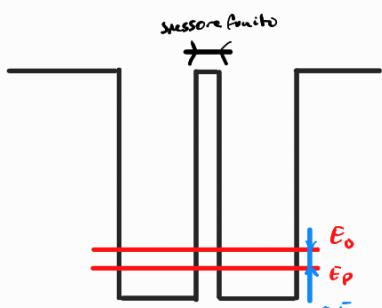
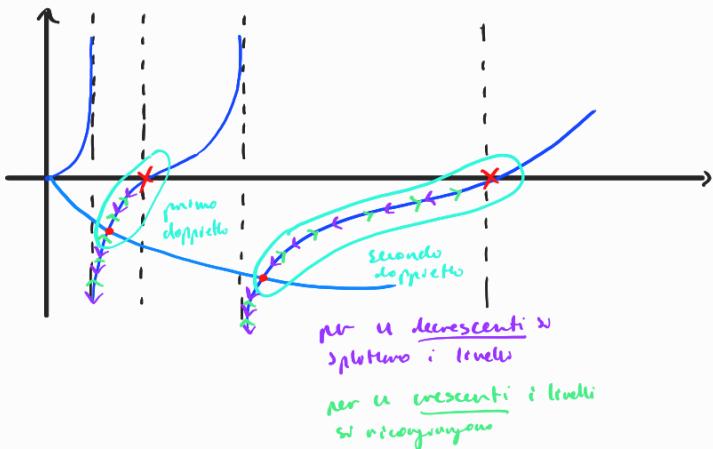


caso $u \rightarrow 0$



nel caso di più n (u suff. piccolo per avere splitting ma non ϕ)





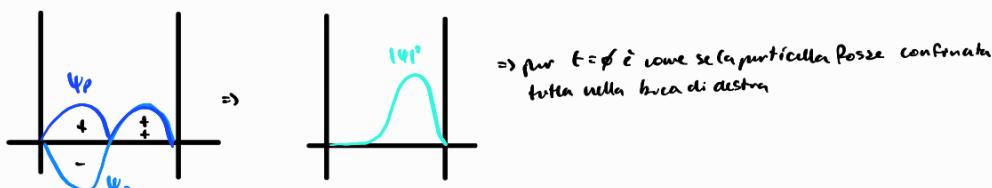
tro anche le code evanescenti:

$$\Rightarrow \Psi(x, t) = a_p \Psi_p e^{-i \frac{E_p}{\hbar} t} + a_0 \Psi_0 e^{-i \frac{E_0}{\hbar} t}$$

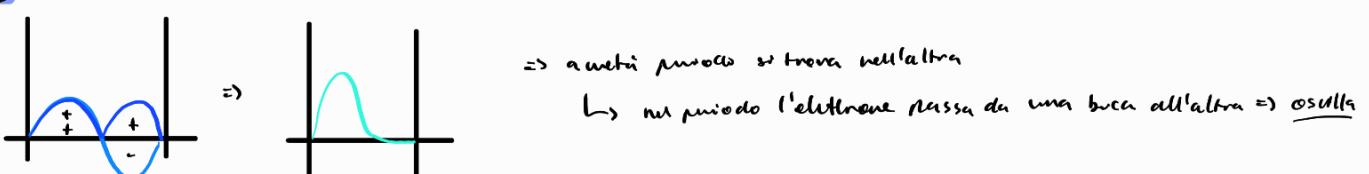
$$= e^{-i \frac{E_0}{\hbar} t} (a_p \Psi_p + a_0 \Psi_0 e^{-i \frac{E_0 - E_p}{\hbar} t})$$

$$|\Psi|^2 = |a_p \Psi_p + a_0 \Psi_0 e^{-i \frac{\Delta E}{\hbar} t}|^2 \Rightarrow w = \frac{\Delta E}{\hbar}; v = \frac{\Delta E}{\hbar} \Rightarrow T = \frac{\hbar}{\Delta E} \quad \text{per } u \rightarrow \infty, \Delta E \rightarrow 0 \Rightarrow T \rightarrow \infty \quad \text{cioè l'elettrone sta da una buca e non va mai nell'altra}$$

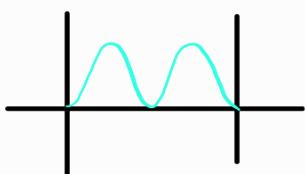
per $t = 0$



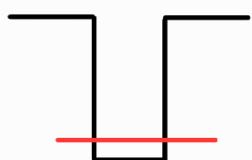
per $t = \frac{T}{2}$



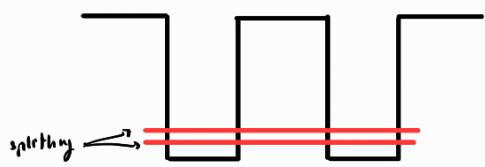
per $t = \frac{T}{4}, \frac{3T}{4}$



Potenziali periodici

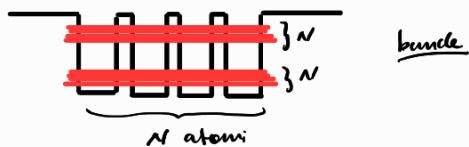


(atomo)



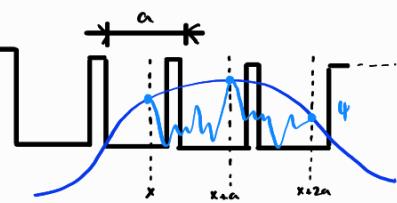
(molecola)

legame bonding: livello ponni
legame anti-bonding: livello disponi



bundle

teo. di Bloch



$$V(x+a) = V(x) \quad \text{pot. periodico qualiasi}$$

$$(I) \text{ allora} \Rightarrow \Psi(x+a) = \Psi(x) e^{ika}$$

(indipendentemente dal fatto che Ψ sia un'onda piana o nera)

periodico avendo
di un fattore

$|\Psi(x+a)|^2 = |\Psi(x)|^2$ è periodico! (In senso, se il pot. è periodico è ragionevole aspettarsi che lo sia anche la d.d.p. Non c'è un motivo per cui debba preferire una buca rispetto l'altra)

$$(II) \Psi_k(x) = u_k(x) \cdot e^{ikx}$$

funz. di Bloch

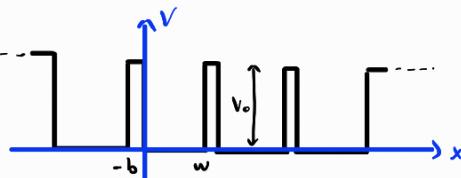
$$u_k(x+a) = u_k(x)$$

$$\Rightarrow |\Psi_k(x)|^2 = |u_k(x)|^2$$

k descrive le autofunz. all'interno della banda
Lo da un "numero quantico" ai livelli all'interno della banda (può essere un numero di onda)

- l'enunciato (I) e (II) sono equivalenti $\Rightarrow \Psi(x+a) = u_k(x+a) e^{ik(x+a)} = u_k(x) \cdot e^{ikx} \cdot e^{ika} = \Psi(x) e^{ika}$

modulo Kronig-Penney



$$a = b + w$$

$$\Psi_w = A_w \sin(\alpha x) + B_w \cos(\alpha x) \quad \alpha = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$\Psi_b = A_b \sin(\beta x) + B_b \cos(\beta x)$$

$$\text{se } E > V_0 \Rightarrow B_+ = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar} \Rightarrow B = B_+$$

$$\text{se } E < V_0 \Rightarrow B_- = \frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar} \Rightarrow B = iB_-$$

$$\begin{cases} \Psi_w(0) = \Psi_b(0) \\ \Psi'_w(0) = \Psi'_b(0) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} B_w = B_b \\ \alpha A_w = \beta A_b \end{cases}$$

2 eq., ma 4 inequaz. \Rightarrow teo. di Bloch impone una condiz. di periodicità

$$\left\{ \begin{array}{l} \Psi_w(w) = \Psi_b(-b) e^{ika} \\ \Psi'_w(w) = \Psi'_b(-b) e^{ika} \end{array} \right. \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} A_w \sin(\alpha w) + B_w \cos(\alpha w) = (-A_b \sin(\beta b) + B_b \cos(\beta b)) e^{ika} \\ \alpha A_w \cos(\alpha w) - \alpha B_w \sin(\alpha w) = (\beta A_b \cos(\beta b) + \beta B_b \sin(\beta b)) e^{ika} \end{array} \right. \text{ moltiplico entrambi per } \beta$$

$$\left\{ \begin{array}{l} B_w = B_b \\ \alpha A_w = \beta A_b \end{array} \right\} \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \beta A_w \sin(\alpha w) + \beta B_w \cos(\alpha w) = (-\alpha A_b \sin(\beta b) + \beta B_b \cos(\beta b)) e^{ika} \\ \alpha A_w \cos(\alpha w) - \alpha B_w \sin(\alpha w) = (\alpha A_b \cos(\beta b) + \beta B_b \sin(\beta b)) e^{ika} \end{array} \right.$$

$$\left[\begin{array}{l} \beta \sin(\alpha w) + \alpha \sin(\beta b) e^{ika} \\ \alpha \cos(\alpha w) - \alpha \cos(\beta b) e^{ika} \end{array} \right] \left[\begin{array}{l} \beta \cos(\alpha w) - \beta \cos(\beta b) e^{ika} \\ -\alpha \sin(\alpha w) - \beta \sin(\beta b) e^{ika} \end{array} \right] \left[\begin{array}{l} A_w \\ B_w \end{array} \right] = \left[\begin{array}{l} 0 \\ 0 \end{array} \right]$$

pero $\det = 0$ (ho una sola soluz.)

$$-\underline{\alpha \beta \sin^2(\alpha w)} - \underline{\beta^2 \sin(\alpha w) \sin(\beta b)} e^{ika} - \underline{\alpha^2 \sin(\alpha w) \sin(\beta b)} e^{ika} - \underline{\alpha \beta \sin^2(\beta b)} e^{ika} = \left(\frac{\text{equazione seolare}}{\text{seolare}} \right)$$

$$\underline{\alpha \beta \cos^2(\alpha w)} - \underline{\alpha \beta \cos(\alpha w) \cos(\beta b)} e^{ika} - \underline{\alpha \beta \cos(\alpha w) \cos(\beta b)} e^{ika} + \underline{\alpha \beta \cos^2(\beta b)} e^{ika}$$

$$\Rightarrow \underline{\alpha \beta} + \underline{\alpha \beta e^{ika}} = \underline{2 \alpha \beta \cos(\alpha w) \cos(\beta b)} e^{ika} - \underline{(\alpha^2 + \beta^2) \sin(\alpha w) \sin(\beta b)} e^{ika} \quad \text{divido per } e^{ika}$$

$$\Rightarrow \alpha \beta \underbrace{(e^{-ika} + e^{ika})}_{2 \cos(ka)} = 2 \alpha \beta \cos(\alpha w) \cos(\beta b) - (\alpha^2 + \beta^2) \sin(\alpha w) \sin(\beta b)$$

$$\Rightarrow \cos(ka) = \cos(\alpha w) \cos(\beta b) - \frac{(\alpha^2 + \beta^2)}{2 \alpha \beta} \sin(\alpha w) \sin(\beta b)$$

energia contenuta in $\alpha \epsilon \beta$, e b è w
sono contigui in geometria

L' k è legata a questi parametri quando in qualche modo descrive i livelli energetici

$$\left\{ \begin{array}{l} \alpha_0 := \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar}} \\ \gamma := \frac{E}{V_0} \end{array} \right. \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \alpha = \alpha_0 \sqrt{\gamma} \\ \beta_+ = \alpha_0 \sqrt{\gamma - 1} \\ \beta_- = \alpha_0 \sqrt{1 - \gamma} \end{array} \right.$$

caso $E > V_0$

$$\Rightarrow \cos(ka) = \cos(\alpha_0 \sqrt{\eta}) \cos(\alpha_0 \sqrt{\eta-1}) - \frac{2\eta-1}{2\sqrt{\eta(\eta-1)}} \cdot \sin(\alpha_0 w \sqrt{\eta}) \cdot \sin(\alpha_0 b \sqrt{\eta-1}) = f_+(E)$$

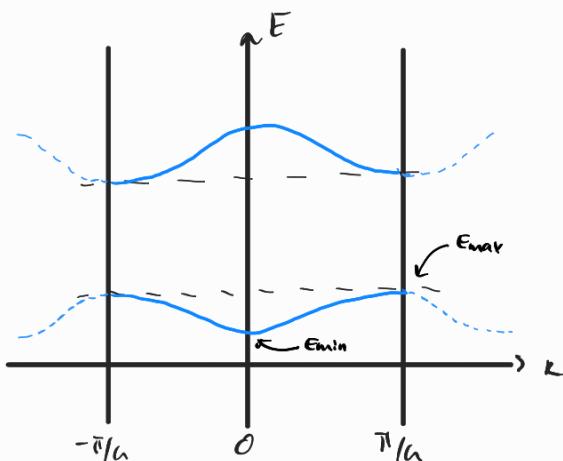
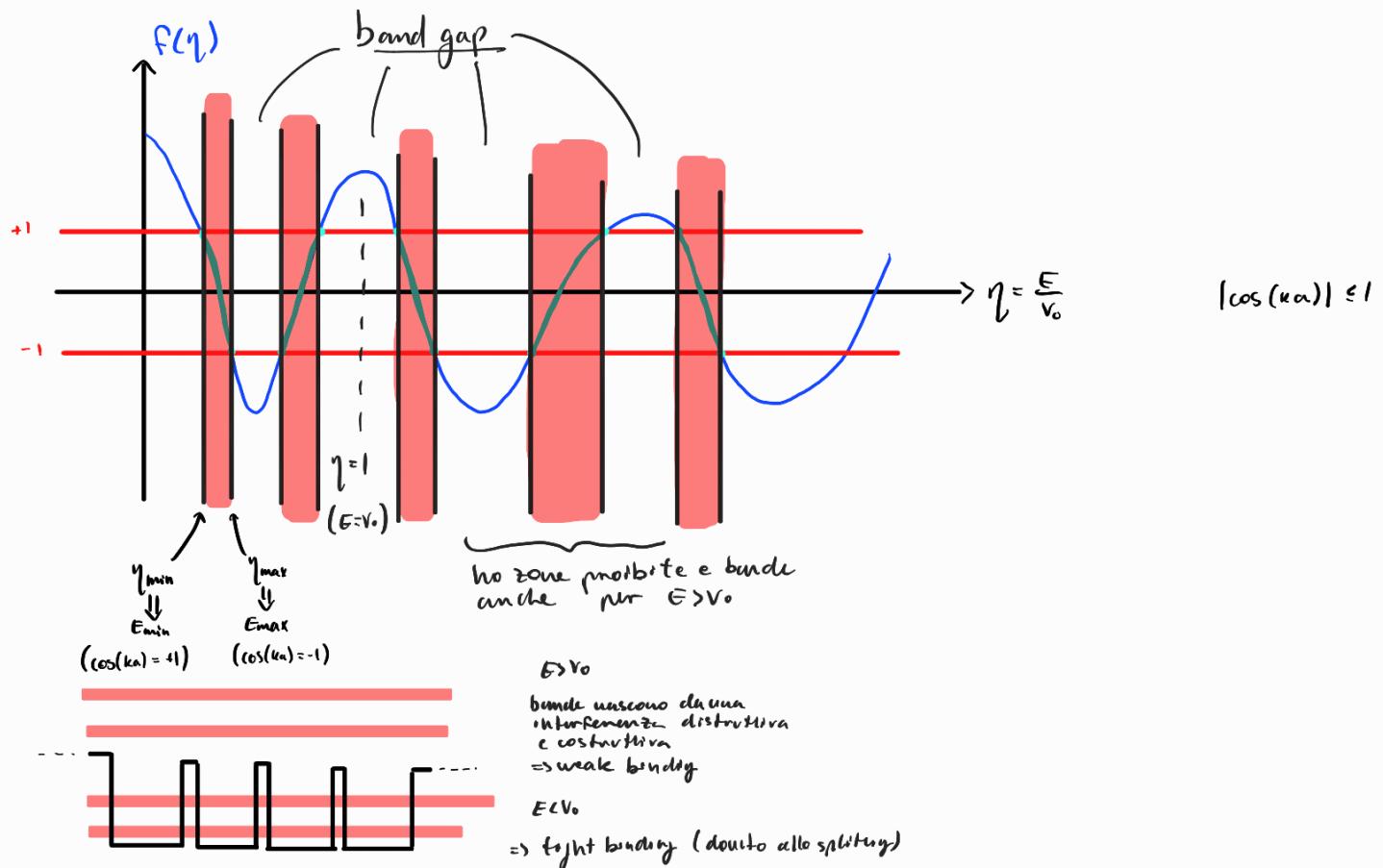
caso $E < V_0$

$$\cos(ka) = \cos(\alpha_0 \sqrt{\eta}) \underbrace{\cosh}_{\beta = i\beta}(\alpha_0 \sqrt{\eta-1}) - \frac{2\eta-1}{2\sqrt{\eta(1-\eta)}} \cdot \underbrace{\sin(\alpha_0 w \sqrt{\eta})}_{\sin(ix) = i\sin(x)} \underbrace{\cosh}_{\sinh(ix) = i\sinh(x)}(\alpha_0 b \sqrt{\eta-1}) = f_-(E)$$

$$\Rightarrow \cos(ka) = \cos(\alpha_0 \sqrt{\eta}) \cosh(\alpha_0 \sqrt{\eta-1}) - \frac{2\eta-1}{2\sqrt{\eta(1-\eta)}} \cdot \sin(\alpha_0 w \sqrt{\eta}) \sinh(\alpha_0 b \sqrt{\eta-1}) = f_-(E)$$

- $f_+(V_0) = f_-(V_0)$

- $\cos(ka) = f(E) \Rightarrow |\cos(ka)| \leq 1 \Rightarrow |f(E)| \leq 1 \Rightarrow$ l'eq. ammette sol. solo in certe regioni!

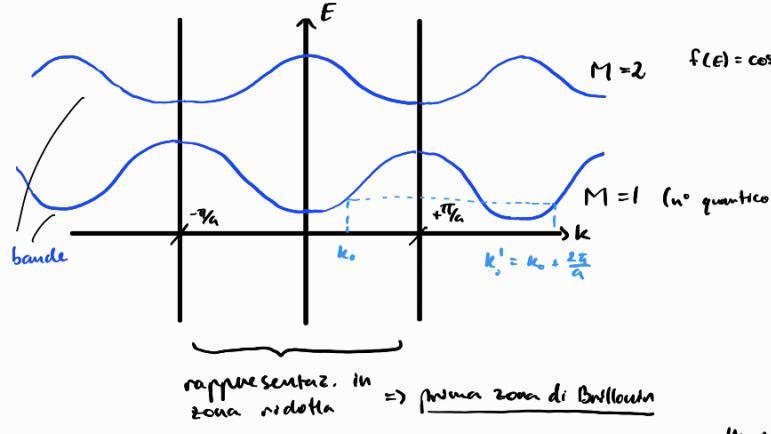


$$\cos(ka) \approx +1 \Rightarrow ka = 0 \pm n2\pi \Rightarrow k = 0 \pm n \frac{2\pi}{a}$$

$$\cos(ka) \approx -1 \Rightarrow ka = \pm \pi \pm n2\pi \Rightarrow k = \pm \frac{\pi}{a} \pm n \frac{2\pi}{a}$$

$\Psi_k(x) = U_k(x) e^{ikx} \Rightarrow$ In ogni periodo si trova la stessa auto-funzione ma sfasata. Posso anche immaginare che l'elettrone sia "sfascato" nel cristallo, a partire di considerare $U_k(x) \sim \cos kx$.

$$U_k(x+a) = U_k(x)$$



$$f(E) = \cos(ka) \Rightarrow k = \frac{1}{a} (\arccos(f) + n\pi)$$

$$k' = k + n \frac{2\pi}{a} \quad \text{Il } k \text{ corrisponde alla } E_k \text{ e } \Psi_k$$

• k_0 e k'_0 rappresentano la stessa energia \Rightarrow stessa autoval.

↳ le altre zone di Brillouin non mi danno info su autoval. / autofunz.

$$\Rightarrow \begin{array}{l} \Psi_{k'} = U_{k'} e^{ik'x} \\ \Psi_k = U_k e^{ikx} \end{array} \quad \text{concidono}$$

$$U_{k'} e^{ik'x} = U_k e^{-ikx} \cdot e^{in\frac{2\pi}{a}x} = U_k e^{-in\frac{2\pi}{a}x} \Rightarrow \boxed{[U_{k'} = U_k]} \quad \begin{array}{l} \text{U}_k \text{ periodica} \\ \text{e}^{-igx} \text{ periodica} \end{array}$$

onda plana
periodica

$$\text{chiamo } g = n \frac{2\pi}{a} \Rightarrow \lambda_g = \frac{2\pi}{g} = \frac{a}{n}$$

↳ è un'onda plana che ha λ sottomultiplo del passo del reticolato

$$\Rightarrow \begin{array}{c} \longrightarrow a \quad x \quad a \longleftarrow \\ \text{---} \\ \text{(e.g. } n=4) \end{array}$$

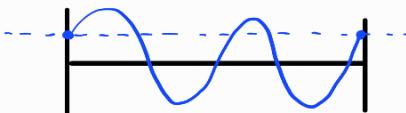
condiz. al confine

① considero un cristallo finito \Rightarrow condiz. di ammattamento agli estremi \Rightarrow

$$\begin{cases} \Psi_k(0) = \phi \\ \Psi_k(Na) = \phi \end{cases}$$



② condiz. periodiche al confine \Rightarrow suppongo la periodicità $\Rightarrow \Psi_k(0) = \Psi_k(Na)$



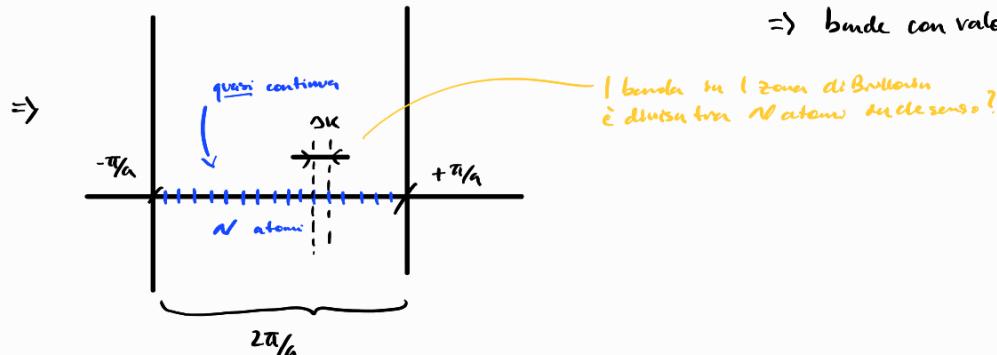
- In ① è un caso più specifico della ② ($\Psi_k(0) = \Psi_k(Na) = \phi$) e quindi più forte \Rightarrow è più comodo trattare la ②
- è più una condiz. matematica che fisica. È come se l'elettrone esce da un estremo e entra dall'altro

$$\Psi_k(0) = \Psi_k(Na) \Rightarrow U_k(0) \cdot e^0 = U_k(Na) e^{ikNa} \Rightarrow kNa = n2\pi \Rightarrow k = \frac{2\pi}{a} \cdot \frac{n}{N} \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \frac{N}{2}$$

$$(k \in [-\frac{\pi}{a}; +\frac{\pi}{a}] \text{ prima zona Brillouin})$$

$$\Delta k = k_{n+1} - k_n = \frac{2\pi}{a}$$

\Rightarrow bande con valori ammessi di k discreti

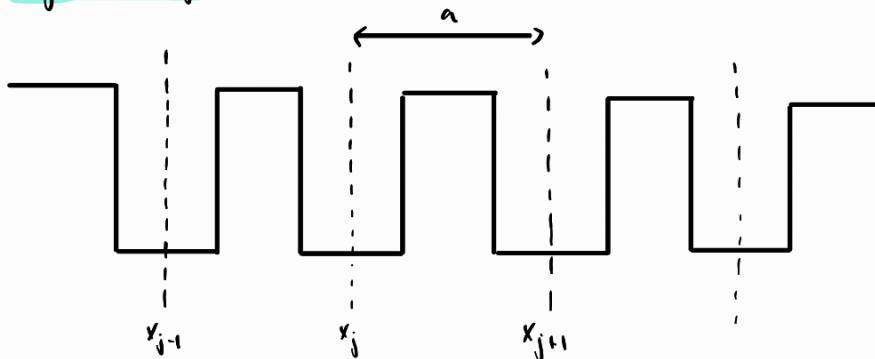


due appross. possibili:

- * tight binding \Rightarrow vede l'elettrone come legato all'atomo
- * weak binding \Rightarrow elettrone come sfuggito e entra nel cristallo e ci si intengisce

$\} \Rightarrow$ entrambi arrivano ad una descriz. simile della banda

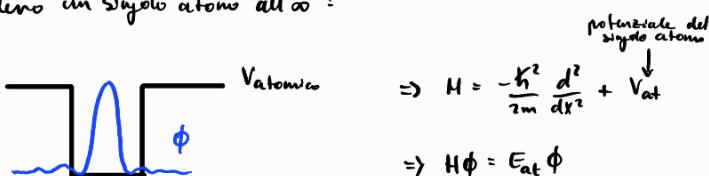
tight binding



$$\Rightarrow H = -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2}{dx^2} + V_c \quad \text{pot. periodico}$$

$$\Rightarrow H \Psi_k = E_k \Psi_k$$

• considerano un singolo atomo all'infinito:



$$\Rightarrow \Psi_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j c_j \phi(x-x_j)$$

è una sorta di normalizzazione.

teo. di tight binding: considerano il cristallo come sovrapp. lin. di tanti potenziali atomici

$$c_j = e^{ikx_j} \Rightarrow \text{è un fascio che ruota in modo elicoidale lungo il reticolto}$$



$$\Psi_k(x+a) = \Psi_k(x) e^{ika} \quad (\text{teo. di Bloch})$$

$$\Rightarrow \Psi_k(x+a) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{ikx_j} \phi(x-x_j+a) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{ik(x_j-a)} \cdot \phi(x-(x_j-a)) e^{ika}$$

$= \Psi_k(x) e^{ika}$

è come se stessi contando per tendo più con uno shift a sx dell'indice j

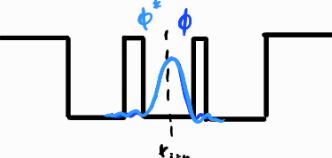
$$\text{quindi giustifica } c_j = e^{ikx_j}$$

$$\langle E_k \rangle = \int \Psi_k^* \hat{H} \Psi_k dx = \int \Psi_k^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_c \right) \Psi_k dx = \frac{1}{N} \cdot \sum_{j,n}^N e^{-ik(x_j-x_n)} \cdot \int \phi^*(x-x_j) \hat{H} \phi(x-x_n) dx$$

$c_j = c_n$

↑
doppia sommatoria
(no sia Ψ_k che Ψ_k^*)

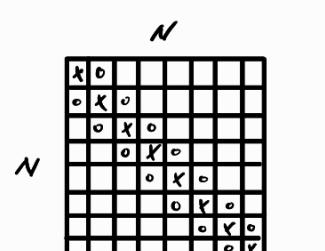
* j^{th} diagonale



$$\Rightarrow \langle E_k \rangle = \int \phi^*(x-x_j) \hat{H} \phi(x-x_n) dx = E_{\text{atomico}}$$

↑
appross. \hat{H} a \hat{H}_{atomico} (cioè $V_c = V_{\text{atomico}}$)
perché ϕ^* e ϕ sono in una stessa singola buca

Il punto di partenza del conteggio degli atomi è indifferente per via della periodicità agli estremi



* $j = n \pm 1$ punti interni

$$\Rightarrow \int \phi^*(x-x_j) \hat{f} \phi(x-x_n) = -\beta$$

β : integrale di scontro

In sovrapp. tra ϕ e ϕ^* è significativa solo dove si sovrappongono le due "code".
L'inf. sarà max. nella barriera.

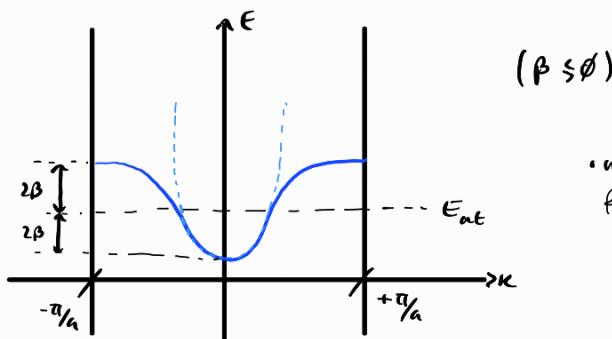
- meno sono avanzaenti le code (cioè ha più tunneling), più è grande β e viceversa

* per $j = n \pm 2, n \pm 3, \dots$, la sovrapp. non è significativa
↳ li trascurri



$$\Rightarrow \langle E_k \rangle = \frac{1}{N} \left[\underbrace{N \cdot E_{at}}_{j=n} + \underbrace{(-\beta) \cdot N \cdot e^{ika}}_{j=n+1} + \underbrace{(-\beta) N e^{ika}}_{j=n-1} \right] \Rightarrow \langle E_k \rangle = E_{at} - 2\beta \cos(ka)$$

$(x_j - x_n = a) \quad (x_j - x_n = -a)$

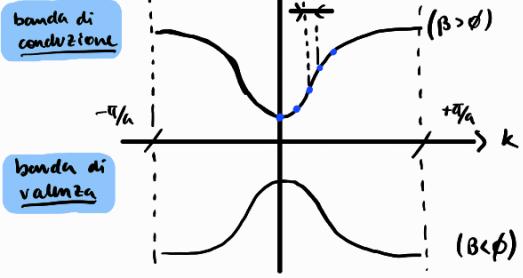


• nell'intorno del minimo (o massimo) possiamo fare una appross. parabolica

$$\Rightarrow E(k) \sim E|_{\min} + \frac{1}{2} \frac{d^2 E}{dk^2} \Big|_{\min} k^2 = E_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \Rightarrow \text{descriviamo l'elettrone come libero! (è una molecola semplicez.)}$$

↑
(con un po' di fantasia)
relaz. di dispersione per una particella libera

$$\Rightarrow \frac{\hbar^2}{m^*} = \frac{d^2 E}{dk^2} \Rightarrow m^* = \frac{\hbar^2}{\frac{d^2 E}{dk^2}|_{\min}}$$



$$E(k) = E_0 - 2\beta \cos(ka)$$

$$k = \frac{2\pi}{a} \cdot \frac{n}{N} \quad n = 0, \pm 1, \dots, \pm \frac{N}{2}$$

$$\Delta k = \frac{2\pi}{a}/N$$

$$\Psi_k = U_k e^{ikx}$$

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

approssimaz. semi classica

$$v_g = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} = \frac{dw}{dk} \quad \text{velocità di gruppo}$$

$$\tilde{F} = \text{forza} = -qF$$

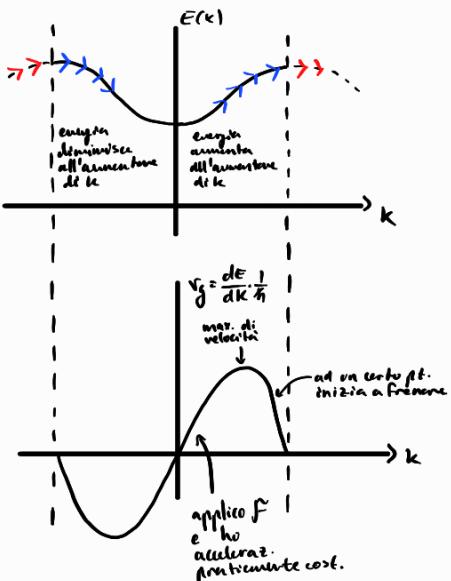
campo elettrico

$$\begin{aligned} \int \tilde{F} dx = dE \\ (\text{lavoro}) \quad (\text{var. dell'energia}) \end{aligned} \Rightarrow \int \frac{dr}{dt} = \frac{dE}{dt} \Rightarrow \int v_g = \frac{\tilde{F}}{\hbar} \frac{dE}{dk} = \frac{dE}{dt} = \frac{dE}{dk} \cdot \frac{dk}{dt}$$

$$\Rightarrow \frac{\tilde{F}}{\hbar} \cdot \frac{dk}{dt} = \frac{dE}{dk} \cdot \frac{dk}{dt} \Rightarrow \tilde{F} = \hbar \frac{dk}{dt}$$

applicare una forza all'elettrone si riflette su una var. del k nel tempo \Rightarrow l'elettrone si muove nella banda

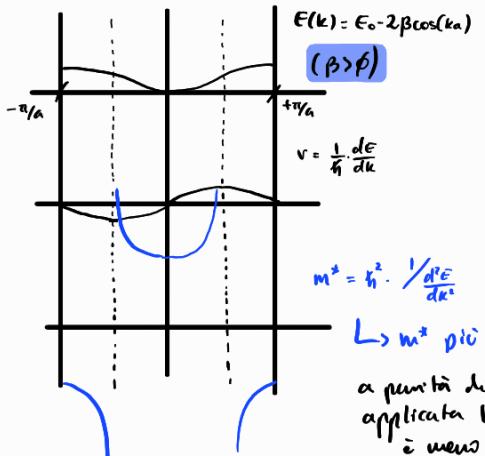
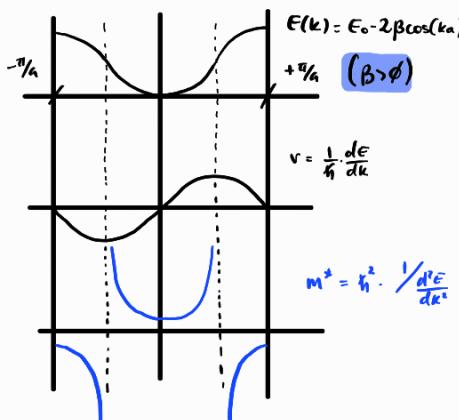
- cambiando k cambia l'energia: potrebbe aumentare, come anche diminuire, ma non è così bizzarro come potrebbe sembrare inizialmente. Questo succede perché l'elettrone è soggetto a forze maggiori che sono quelle che risente dal fatto che sta in un cristallo, cosa già tenuta in conto in quanto nell'eq. di Schrödinger compare il potenziale V .



$$\alpha = \frac{dr}{dt} = \frac{d}{dt} \left[\frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} \right] = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2E}{dk^2} \cdot \frac{dk}{dt} \Rightarrow \alpha = \frac{\tilde{F}}{\hbar^2} \cdot \frac{d^2E}{dk^2} \cdot \frac{1}{m^2}$$

$$\Rightarrow \alpha = \frac{\tilde{F}}{m^2} \quad \text{con} \quad m^2 = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2E}{dk^2}$$

coincide con quanto già ottenuto con l'approx. parabolica



caso β piccolo:

$$-\beta = \int \phi^*(x_j) \hat{H} \phi(x_{j+1}) dx$$

β è l'espressione della capacità dell'elettrone tra una buca e l'altra (è una espressione della sovrapp. di autofunz. adiacenti)

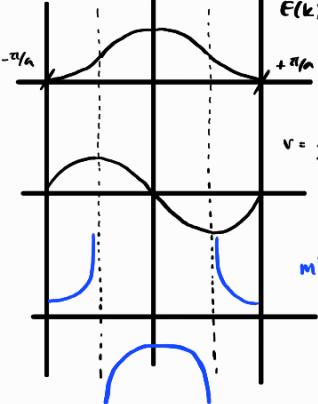
\hookrightarrow più l'elettrone è legato all'atomo e meno mobile

$$E(k) = E_0 - 2\beta \cos(ka)$$

$(\beta < 0)$

$$v = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk}$$

$$m^* = h^2 \cdot \frac{1}{\beta^2} \frac{d^2E}{dk^2}$$



- ci sono regioni per cui $m^* < 0 \Rightarrow$ applico una forza in un verso e accelerano nel verso opposto (strano!). In realtà non c'è da stupirsi, ci sono infatti le interaz. / forze del reticolo

$(T = \phi k)$

(BC vuoti)

(BV pieni)

N stati occupati da $2N$ elettroni
(ogni stato ha 2 elettroni, spin up e spin down)

tempo di percorrenza

$$I_V = \sum_{i, \text{ pieni}} \frac{-q}{\epsilon_i} \leftarrow \begin{array}{l} \text{semmetria sugli stati} \\ (\text{esimi pieni}) \end{array}$$

$$= -q \sum_{i, \text{ tutti}} \frac{v_i}{L} = -\frac{q}{L} \sum_{i, \text{ tutti}} v_i = \phi$$

Visto con v_V ho uno opposto con $-v_V$ quindi tutti gli elettroni si muovono ma $\langle v \rangle = 0$

(si parla di stati elettronici:
VK ha 2 stati elettronici)

$\Rightarrow I = \phi$ in una banda totalmente piena (anche in presenza di campo elettrico)

(T ambiente)

$(F = \phi)$

$$\begin{cases} I_C = -\frac{q}{L} \sum_{i, \text{ pieni}} v_i = \phi \\ I_V = -\frac{q}{L} \sum_{i, \text{ pieni}} v_i = \phi \end{cases}$$

$(F \neq \phi)$

$F \neq \phi \Rightarrow F = \frac{1}{\hbar} \frac{dk}{dt}$ sto applicando una forza, il che mi causa uno spostamento/sbilanciamento degli elettroni

\hookrightarrow le velocità non si compensano più

$$\Rightarrow \begin{cases} I_C \neq \phi \\ I_V \neq \phi \end{cases}$$

$$I_{TOT} = I_C + I_V$$

$$I_V = -\frac{q}{L} \sum_{i, \text{ pieni}} v_i = -\frac{q}{L} \left[\sum_{i, \text{ vuoti}} v_i - \sum_{i, \text{ vuoti}} v_i \right] = +\frac{q}{L} \sum_{i, \text{ vuoti}} v_i$$

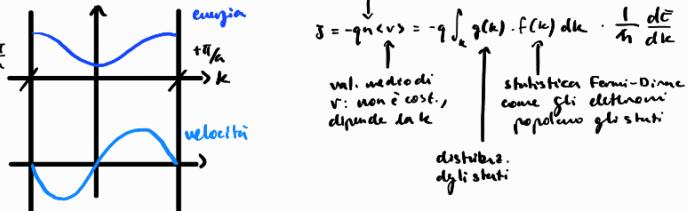
Invece di considerare una manea di elettroni, riferisco su pochi stati vuoti come se fossero cariche positive

$$I_C = -\frac{q}{L} \sum_{i, \text{ pieni}} v_i$$

\uparrow
elettroni

ricoverso nella banda di condut. annie una manea di lacune e quindi ragiono sugli elettroni

oscillazione di Bloch



in presenza di $F < 0 \Rightarrow j = -qF > 0$

$$\Rightarrow \frac{dk}{dt} = \frac{F}{\hbar} \Rightarrow k = k_0 + \frac{F}{\hbar} t$$

light bandy: $E(k) = E_0 - 2\beta \cos(k_0 a + \frac{Fa}{\hbar} t)$

$$V(k) = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} = -2\beta \sin(k_0 a + \frac{Fa}{\hbar} t) \cdot a$$

\Rightarrow oscillazione di Bloch

\hookrightarrow corrente alternata

applico un campo costante F , e per effetto delle periodicità della banda, otengo un andamento oscillatorio della velocità e quindi della corrente

freq. di Bloch: $\omega = \frac{Fa}{\hbar} \Rightarrow \nu = \frac{qFa}{\hbar}$ F=100kV/cm, a=0.3nm $\Rightarrow \nu \approx 1\text{THz}$ $T = \frac{1}{\nu} \approx 1\text{ps}$

val. tipiche per legica CMOS

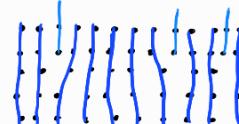
$T \approx 1\text{ps}$ sulla scala del moto elettronico è tanto, quindi prima che l'elettrone riesca a compiere il moto di un periodo incontrerà un evento di scattering.

\hookrightarrow quindi in realtà non si manifesta in generale questo meccanismo di oscillaz. di Bloch

Scattering

1) difetti: * vacanza (mancanza di un atomo): è un difetto che dipende dalla statistica termodinamica, non è un difetto strutturale

* dislocazioni:



ha posizioni compiute degli altri
 \Rightarrow assuncono posizioni verticali

* bordi di frane

* superficie ionizzata: sono il contributo principale dello scattering. Un esempio è il fosforo P^+ o boro B^- nel silicio elargito

2) vibraz. elastiche (foton: quasi particelle)

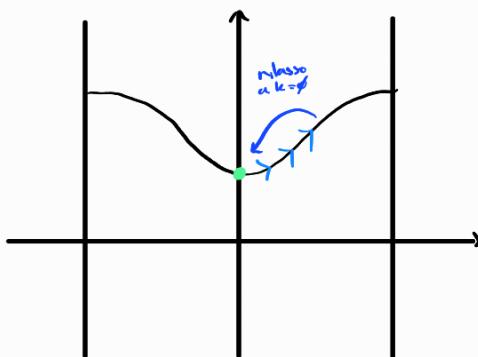
immagino gli atomi come se legati da molle

l'energia di vibraz. è quantizzata

i fronti d'onda associati al moto vibraz. li vedo come quasi-particelle



riassunto del momento



$$T_m = 10^{-13} s < T_{\text{Bloch}} = 1 \mu s$$

\hookrightarrow non osservano oscillaz. di Bloch

modello Drude

- tenere conto degli eventi di scattering

$$\frac{dk}{dt} = \frac{f_k}{h} \Rightarrow \frac{dk}{dt} = \frac{f_k}{h} - \frac{k}{\tau_m} \quad \Rightarrow \text{eq. diff.}$$

↗ ↗
 "acceleration" "attivita' wsusa" nel
 $\frac{dr}{dt}$ $\left(\frac{dk}{dt}\right)$ senso che è $\propto r(k)$
 e si oppone all'acceleraz. (forze)

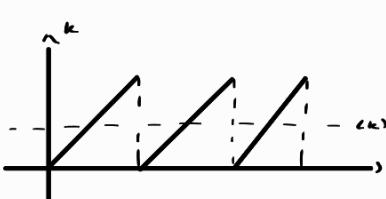
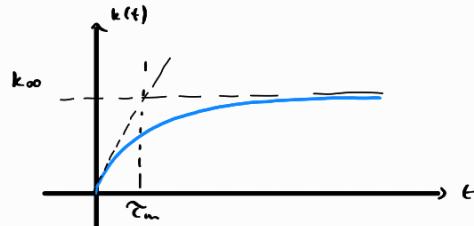
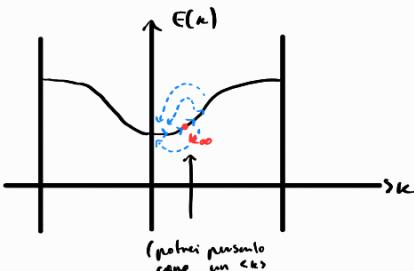
tempos le come momenti: tempo & r (qualitativamente)

risolvendo trovo $\Rightarrow k(t) = k_{\infty} \left[1 - e^{-t/\tau_{cm}} \right]$

$$t \ll T_m \quad \frac{dk}{dt} \sim \frac{k}{T_m} \Rightarrow k = \frac{k_0}{T_m} t \quad \text{mais eventualmente } k \text{ cresce linearmente}$$

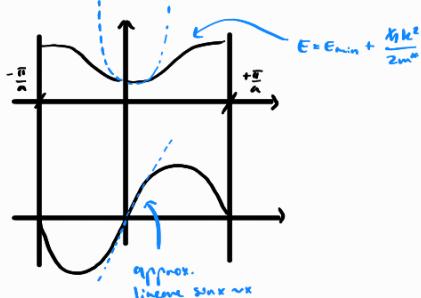
$$t \gg T_m \quad \frac{k_{\text{so}}}{T_m} = \frac{\mu}{\lambda_1} \Rightarrow k_{\text{so}} = \frac{\mu T_m}{\lambda_1} \quad (\text{per } k_{\text{so}} \ll \frac{\pi}{a})$$

per $t \rightarrow \infty$ le oscillazioni si assestano a un val. stazionario (contrariamente al modello di Bloch in cui le controripa e la ripplesone oscillano con la stessa frequenza).



modello alternativo
 \hookrightarrow ottengo (k) nello stesso
 ordine di grandezza di k_0

essendo $k_0 \ll \pi/a \Rightarrow$ approx. parabolica

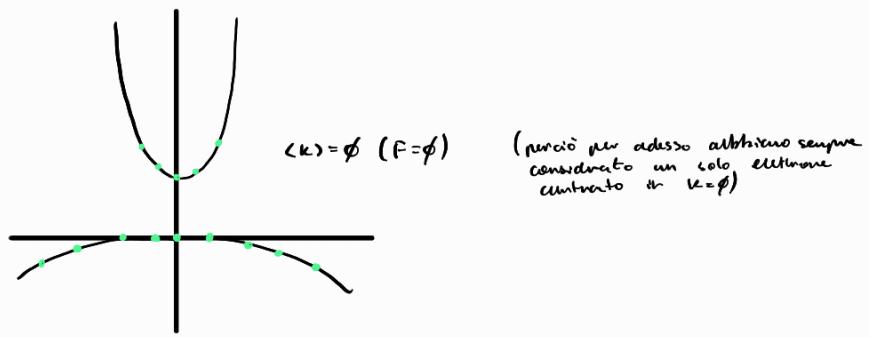


$$\left\{ \begin{array}{l} k_{\infty} = -\frac{q \tilde{\epsilon}_m}{m} F \\ v = \frac{q k}{m^*} \end{array} \right. \Rightarrow v = \frac{-q \tilde{\epsilon}_m}{m^*} \bar{F} = -M_m F$$

$$\mu_n = \frac{q C_m}{m^x}$$

applicare un campo non ne accenna
l'elettronico, ma ne lo porta ad
un val. cost.

$$M_n \sim 10 - 1000 \text{ cm}^2/\text{V-s}$$



$$J = qnvr = qn\mu_n F \Rightarrow J = n_F F = \frac{1}{f_n} F \quad \text{legge di Ohm locale}$$

$$f_n = \frac{1}{q n \mu_n} [\Omega \cdot \text{cm}] \sim 10 \mu\text{m}^2 \cdot \text{cm}$$

$$f(A_f) = 1,6 \mu\text{m}^2 \cdot \text{cm}$$

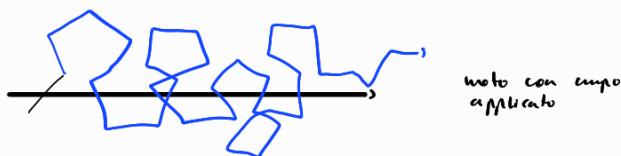
$$f(C_f) = 1,68 \mu\text{m}^2 \cdot \text{cm}$$

$$f(T_f) = 22 \mu\text{m}^2 \cdot \text{cm}$$

$$\lambda = \text{mean free path} = v_{th} \cdot \tau_m \quad \frac{1}{2} m^* v_{th}^2 = \langle E \rangle = \frac{3}{2} kT \quad v_{th} \sim 10^7 \text{ cm/s}$$



$\gg \gg$ dimostrare che l'elettrone effettivamente "scivola" sul metallo, come se fosse libero (i problemi sono i difetti)



reticolo reciproco

$$J = -q n v \quad \Rightarrow \text{flusso di carica}$$

↑ flusso
carica

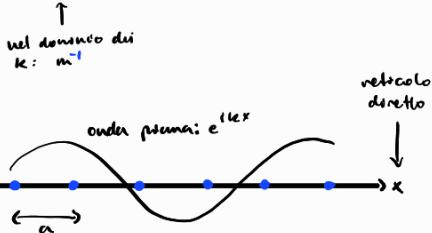
$$v = \mu F$$

$$n = \int g(k) \cdot f(k) dk$$

↑
densità di stati
(stati elettronici)

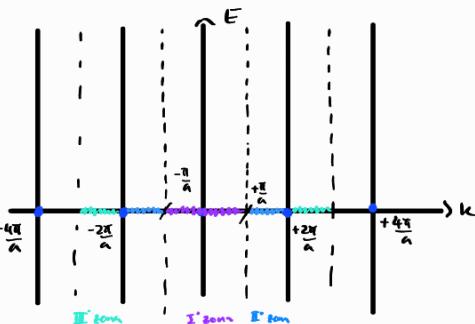
↑
distribuz. energetica
degli elettronni
⇒ statistica di Fermi-Dirac

reticolo reciproco



reticolo reciproco: è composto dai vettori d'onda g l.e. l'onda piana è perpendicola sul reticolo diretto

$$\Rightarrow e^{ig(x+a)} = e^{ix} \quad (\text{in generale: } e^{ig(x+na)} = e^{ix}) \quad \Rightarrow g = \frac{2\pi}{a} n \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$



prima zona di Brillouin: è la cella di Wigner-Seitz del reticolo reciproco

per le seconde, terza ecc. zone, considerano i secondi, terzi primi vettori

$$\underline{20} \text{ c } \underline{30} \Rightarrow e^{i\bar{g} \cdot (\vec{r} + \vec{R})} = e^{i\bar{g} \cdot \vec{r}} \quad \vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$$

$$\Rightarrow e^{i\bar{g} \cdot \vec{R}} = 1 \Rightarrow \bar{g} \cdot \vec{R} = 2\pi n$$

si dimostra che: $\bar{g} = m_1 \bar{b}_1 + m_2 \bar{b}_2 + m_3 \bar{b}_3$ dove $\bar{b}_1, \bar{b}_2, \bar{b}_3$ sono i vett. parametrali del reticolo reciproco
con $\bar{b}_1 = 2\pi \cdot \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1}$

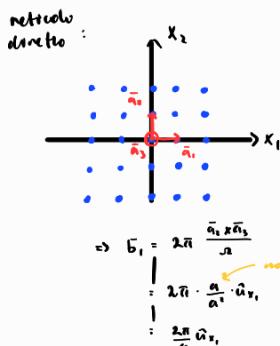
$$\bar{b}_2 = 2\pi \cdot \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a}_2}$$

$$\bar{b}_3 = 2\pi \cdot \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\vec{a}_3}$$

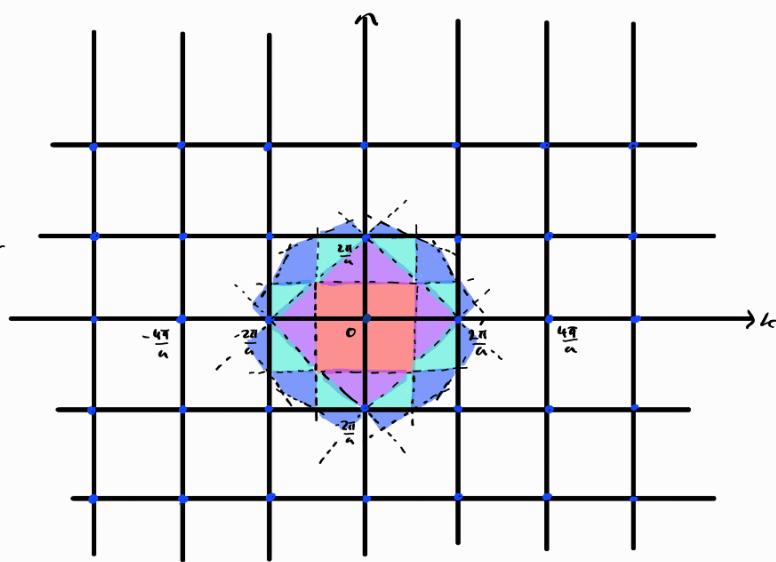
dove $\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3$ volume della cella prismatica del reticolo diretto

$$\Rightarrow \bar{g} \cdot \vec{R} = 2\pi (m_1 m_1 + m_2 m_2 + m_3 m_3) = 2\pi n$$

in 20:



per l' n -esima zona
non deve attraversare
più di $n+1$ primi di Bragg
(ma tralasciati)

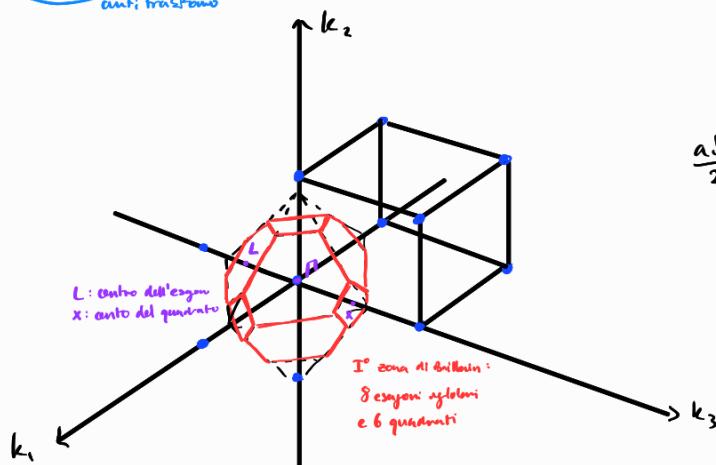


le aree delle zone devono essere esatte per il calcolo della cella prismatica

DIRETTO	RECIPROCO
cubo semplice	cubo semplice
BCC	FCC
<u>FCC</u>	<u>BCC</u>

trasformo
anti-trasformo

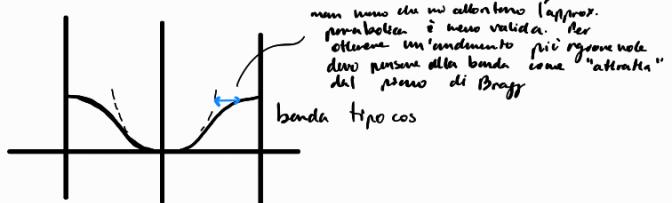
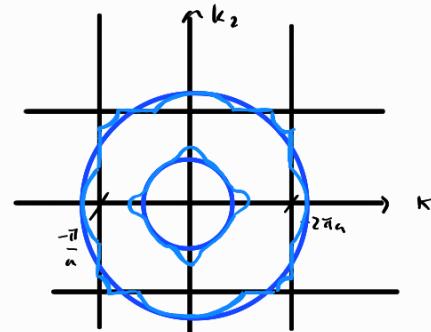
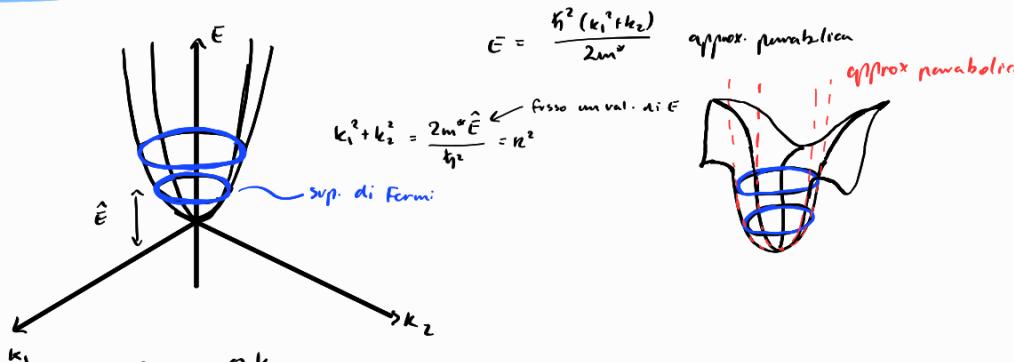
semiconduttori:
(Si, Ge, GaAs)



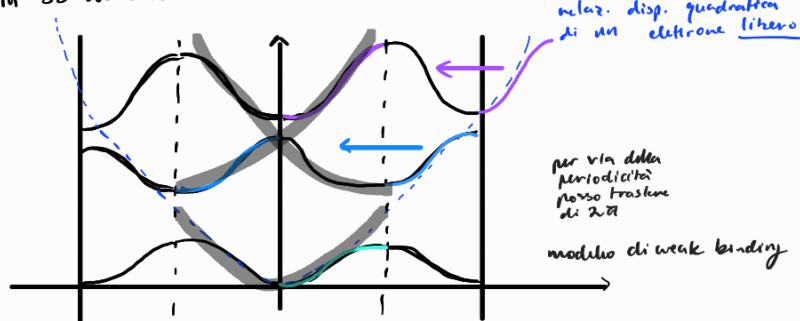
$$\frac{a\sqrt{3}}{2} < a \Rightarrow \text{i primi vicini sono i centri del cubo}$$

dono anche terne più confe
degli atomi sugli assi

Superficie di Fermi

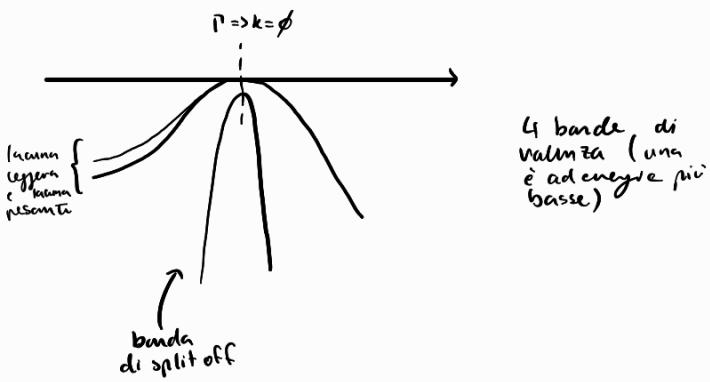


in 3D avrà delle forme con dei "lobi:"



- nei semiconduttori rappresento l'energia lungo direz. perpendicolari

$$\Gamma \rightarrow X \quad (\Delta) \quad \Gamma \rightarrow L \quad (\lambda) \quad (\text{direzioni ad alta simmetria})$$



le bande di valenza per Ge, Si, GaAs sono sostanzialmente uguali

- pur le bande di condus. invece troviamo andamenti molto diversi

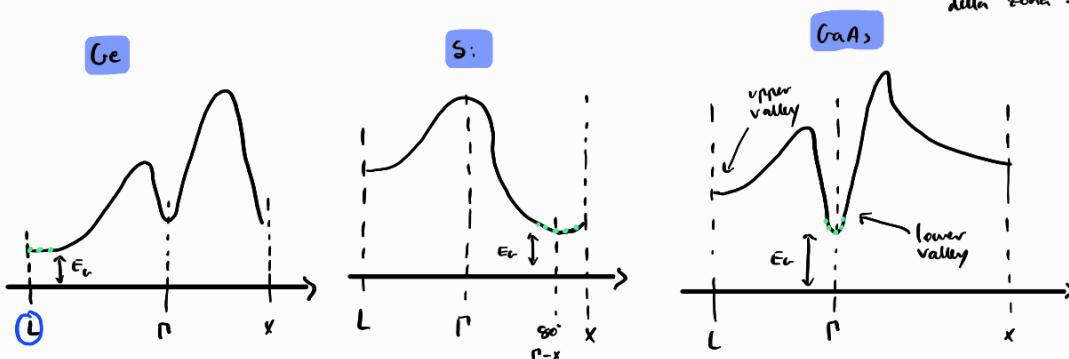
posizione del min. diverso per i materiali

$$\Rightarrow \begin{cases} \text{Ge: punto } L \Rightarrow \text{degeneraz. } 3/2 = 4 \\ \text{Si: 80\% di } \Gamma\text{-X} \Rightarrow \text{degeneraz. } -6 \\ \text{GaAs: } \Gamma \Rightarrow \text{no degeneraz.} \end{cases}$$

ho 8 punti
nel min. è nella prima zona di Brillouin, non sta fuori

sono all'80% di $\Gamma\text{-X}$, quindi tutto il min. è contenuto all'interno della zona di Brillouin

degeneraz. : multieterzi dei minimi



ogni minimo è popolato da elettroni di conduzione

- appross. parabolica nell'intorno del min:

$$E = E_c + \frac{\hbar^2}{2m_e^*} (k_x - k_{x_0})^2 + \frac{\hbar^2}{2m_e^* k_y^2} + \frac{\hbar^2}{2m_e^* k_z^2}$$

↑ longitudinali ↑ trasversali

anisotropia della massa (cambia la curvatura lungo le varie direzioni)

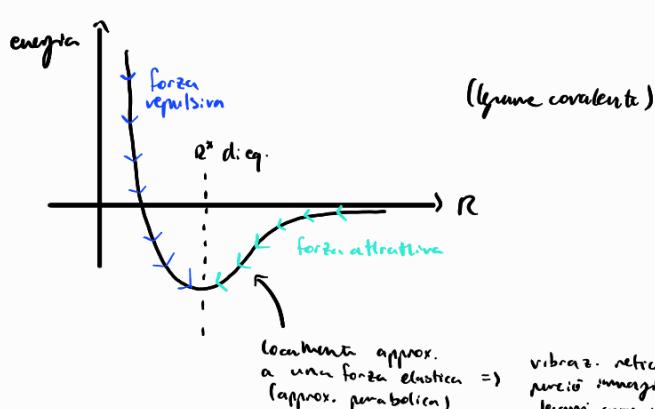
\Rightarrow è l'eq. di un ellisseide

band gap narrowing:

$$E_n(T) = E_n(0) - \frac{\alpha T^2}{T + \beta}$$

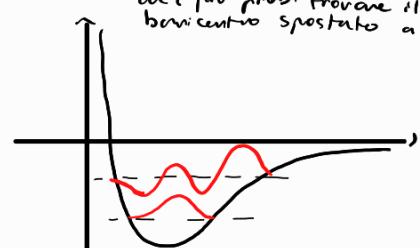
legge di Varshny (legge sperimentale)

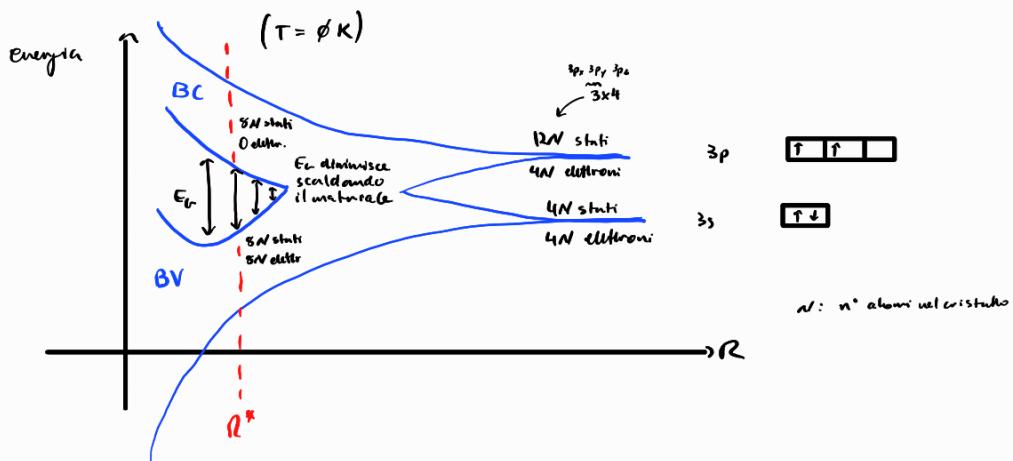
- aumento in temp. \Rightarrow si dilatano i materiali



$$\Gamma^* \rightarrow \phi \text{ per } T \rightarrow 0$$

per T crescente \Rightarrow risolve l'eq. Schrödinger e trova che c'è più prob. trovare il baricentro spostato a dx





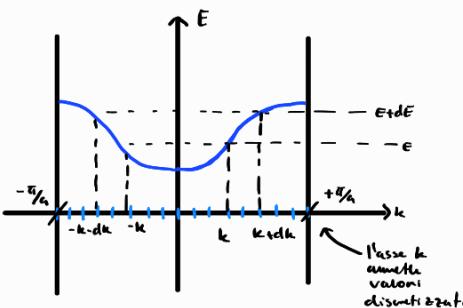
$$J = -q_n v_n \quad ; \quad v_n = \mu_n F \quad n = \int_{B_C} g_n(E) \cdot f(E) dE$$

↑
densità di stati (elettronici)

$$J = +q_p v_p \quad ; \quad v_p = M_p F \quad p = \int_{B_V} g_p(E) \cdot f(E) dE$$

densità di stati

caso 1D



$$k_n = \frac{2\pi}{a} \cdot \frac{n}{N} \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \frac{N}{2}$$

(dalle condizioni di periodicità al contorno)

essendo il numero di k discreto, numerabile, ha senso definire una densità di stati

$$\Rightarrow g(k) \cdot dk = \frac{dk}{2\pi/a} \cdot 2 \cdot 2 \cdot \frac{1}{N} \left[\begin{array}{l} \text{normalizzo per} \\ \text{la dim. del cristallo} \end{array} \right] \Rightarrow g(k) dk = \frac{2}{\pi} dk$$

n° di stati fra k e $k+dk$

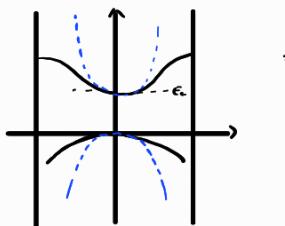
è la densità di stati disponibile da occupare con elettroni \Rightarrow ogni stato orbitale \Rightarrow generazione di spin \Rightarrow orbitale passo nello spazio \uparrow

considerando anche gli stati fermi $\Rightarrow k = |k|$ \Rightarrow in 1D no due versi di propagaz.

$g(E)$ ($g(k)$) come lo determino? Dipende dalla forma della banda

\Rightarrow bisogna generalizzare la forma di una banda

tuttora si interessa soltanto il min. della BC o max. della BV \Rightarrow appross. parabolica



$$\Rightarrow E_c = E + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n^*} \Rightarrow k = \frac{\sqrt{m^*(E-E_c)}}{\hbar}$$

- Hp.
- isotropia della massa nel rettangolo (in 3D m^* è una derivata direzionale \Rightarrow ogni m^* eguale \forall direzione)
 - min./max. centranti in $k=0$
 - unico max./min.

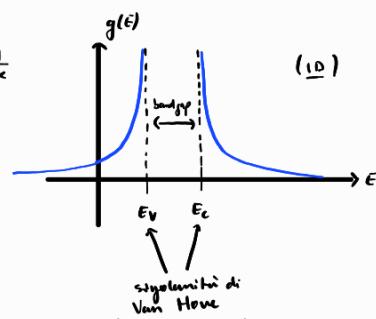
$$g(E) dE = g(k) dk \Rightarrow g(E) = \frac{g(k)}{dk/dE}$$

$$\frac{dE}{dk} = \frac{\hbar^2}{m_n^*} k \Rightarrow g(E) = \frac{2}{\pi} \cdot \frac{1}{\frac{\hbar^2}{m_n^*} \cdot k} = \frac{2}{\pi} \cdot \frac{m_n^*}{\hbar^2} \cdot \frac{1}{k}$$

$$\Rightarrow g(E) = \frac{2}{\pi} \cdot \frac{m_n^*}{\hbar^2} \cdot \frac{k}{\sqrt{2m^*(E-E_c)}}$$

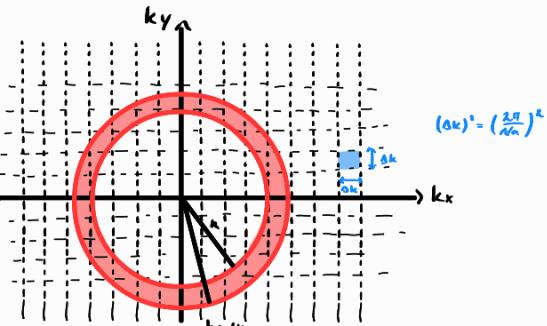
$$\Rightarrow g(E) = \frac{1}{\pi \hbar} \cdot \sqrt{\frac{2m^*}{E-E_c}} \quad (1D)$$

(rispondendo analogo per la banda di valenza una considero $k = \frac{\sqrt{2m^*(E_V-E)}}{\hbar}$)



Caso 2D

2 gradi liberi \Rightarrow 1 grado confinato



(rapporto analogo per la banda di valenza ma considero $k = \sqrt{2m^*(E_F - E)}$)

le circonferenze sono i luoghi dei pt. con $k = k_0 \cos \theta$.

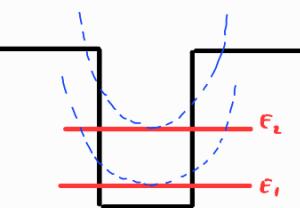
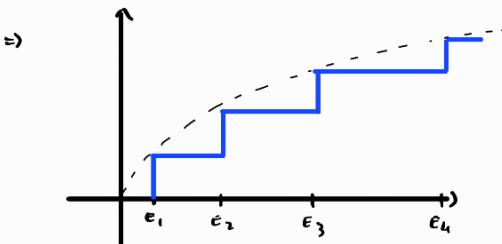
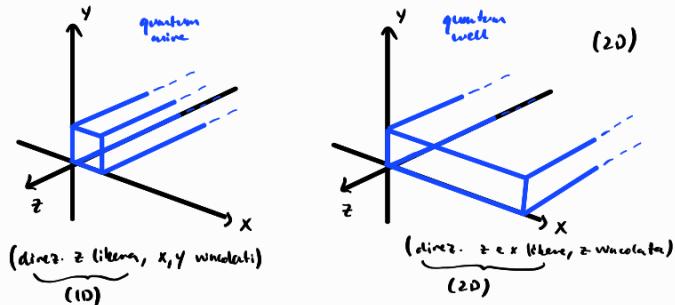
$$\Rightarrow k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2} \quad (k = k_x \hat{u}_x + k_y \hat{u}_y)$$

n° di stati tra k e $k+dk$: $\frac{\text{area della cella}}{\text{area del quadrato}}$

$$\Rightarrow g(k) dk = \frac{2\pi k dk}{(2\pi/\lambda)^2} \cdot 2 \cdot \frac{1}{(\lambda a)^2} \Rightarrow g(k) dk = \frac{k}{a^2} dk$$

dipendenza di spin
area del cristallo (normalizzazione)

$$\Rightarrow g(E) = \frac{g(k)}{dE/dk} = \frac{k/\pi}{m^*/a^2} \Rightarrow g(E) = \frac{m^*}{\pi a^2}$$

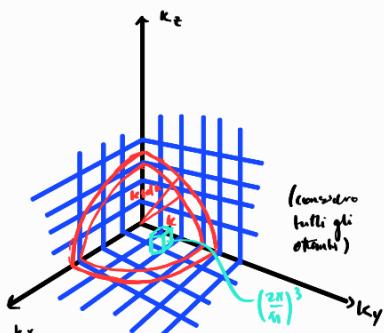


mi trovo nel livello E_1 : ho 1 direz. uncolata, e 2 libere \Rightarrow mi tangenzio una approx. "parabolica" (caso 2D)

\Rightarrow ottieno un quadrato in E ,

avvertendo l'energia, trovo E_2 , che mi dà un ulteriore contributo di grandezza, e così via

Caso 3D



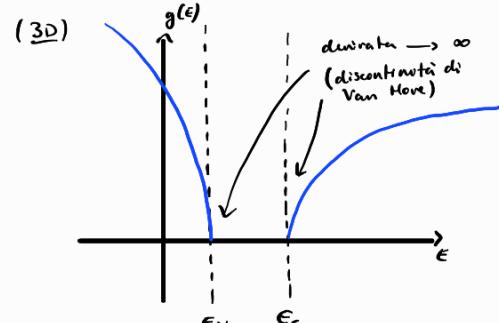
$$k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2}$$

$$\Rightarrow g(k) dk = 2 \cdot \frac{4\pi k^2 dk}{(2\pi/\lambda)^3} \cdot \frac{1}{(\lambda a)^3} = \frac{k^2}{a^3} dk$$

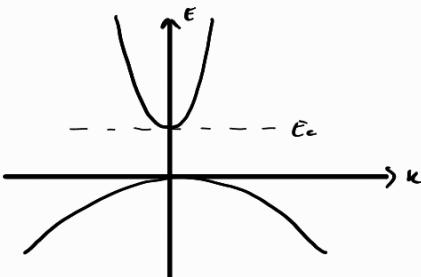
dipendenza spin
volume fascio
volume cella
normalizz. per il volume del cristallo

$$\Rightarrow g(E) = \frac{g(k)}{dE/dk}$$

$$\Rightarrow g(E) = \frac{(2m^*)^{3/2}}{2\pi^2 \cdot a^3} \cdot \sqrt{E - E_c}$$

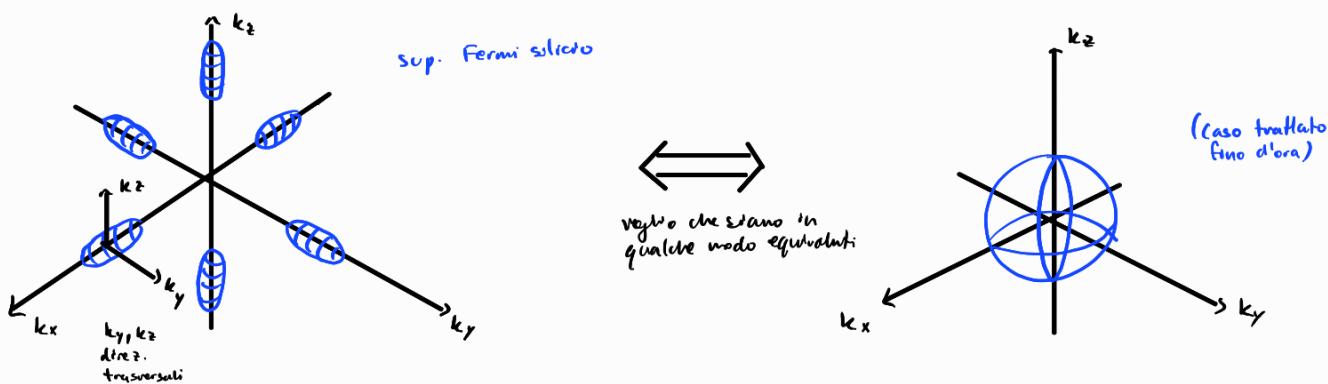


L'unico conduttore che rispetta le 4 regole fatte è GaAs



\Rightarrow occorre generalizzare quanto fatto fino ad adesso per ambienti multipli, messe anisotropie e band gap indiretti

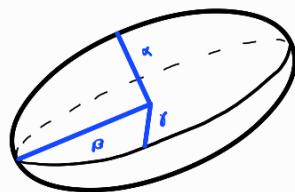
massa efficace DOS (density of states)



\Rightarrow devo trovare m^* t.c. nella sfera siamo contenuti gli stessi stati che negli eliosoidi

$$E = E_c + \frac{\hbar^2(k_x - k_0)^2}{2m_e^*} + \frac{\hbar^2(k_y + k_z)^2}{2m_e^*} \Rightarrow \frac{(k_x - k_0)^2}{\frac{2m_e^*(E-E_c)}{\hbar^2}} + \frac{(k_y^2 + k_z^2)}{\frac{2m_e^*(E-E_c)}{\hbar^2}} = 1$$

k_x direzione longitudinale
 k_y, k_z trasversali



$$V = \frac{4}{3}\pi \alpha \beta \gamma \Rightarrow V = \frac{4}{3}\pi \frac{\sqrt{2m_e^*(E-E_c)}}{\hbar} \cdot \frac{2m_e^*(E-E_c)}{\hbar^2} \cdot g$$

dipendenza
(=6 in questo caso)



\Rightarrow n° stati eliosoidi = n° stati sfera

$$\Rightarrow \frac{V_{\text{eliosodi}}}{V_{\text{sfera}}} = \frac{V_{\text{sfera}}}{V_{\text{eliosodi}}} \Rightarrow V_{\text{eliosodi}} = V_{\text{sfera}}$$

$$\Rightarrow \frac{4}{3}\pi \frac{\sqrt{2m_e^*(E-E_c)}}{\hbar} \cdot \frac{2m_e^*(E-E_c)}{\hbar^2} g = \frac{4}{3} \left[\frac{2m_e^*(E-E_c)}{\hbar^2} \right]^{3/2}$$

con cosa si cancella?

$$\Rightarrow (m_n^*)^{3/2} = g m_e^{1/2} \cdot m_e^*$$

massa DOS

	m_n^*	m_e^*	g	m_{DOS}^*
Si	0,91	0,14	6	1,06
Ge	1,59	0,085	4	0,1553

per quanto riguarda la banda di valenza: tendenzialmente ha l'ultimo, centrato in $k=0$

$$\Rightarrow g(E) = g_{hh}(E) + g_{ch}(E) \quad (\text{come se avessi 2 sfera})$$

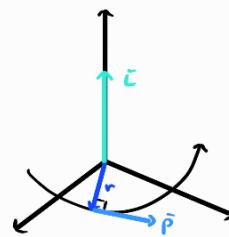
\uparrow
banda
pesante
 \uparrow
banda
leggera

si trovi:

$$m_p^{\frac{3}{2}} = m_{hh}^{\frac{3}{2}} + m_{ch}^{\frac{3}{2}}$$

- "gas" di elettroni (sistema di torni quantici)

movimento circolare : $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$
 (classico)
 posiz. del corpo momento / qt. di moto



- nella meccanica quantistica: \vec{L} è quantizzato

- operatore \hat{L} commuta con \hat{H}

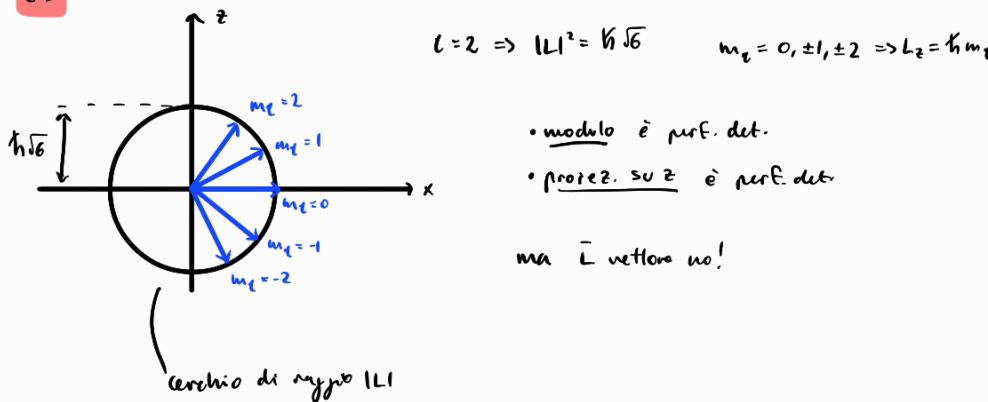
$$|\vec{L}|^2 \text{ è perfettamente det.} \Rightarrow |\vec{L}|^2 = \hbar^2 l \cdot (l+1)$$

\vec{L} no quantico associato
al movimento

$$\begin{array}{c} l=\emptyset \\ \uparrow \\ \text{orbita s} \end{array}, \begin{array}{c} l=1 \\ \uparrow \\ p \end{array}, \begin{array}{c} l=2 \\ \uparrow \\ d \end{array}, \begin{array}{c} l=3 \\ \uparrow \\ f \end{array}$$

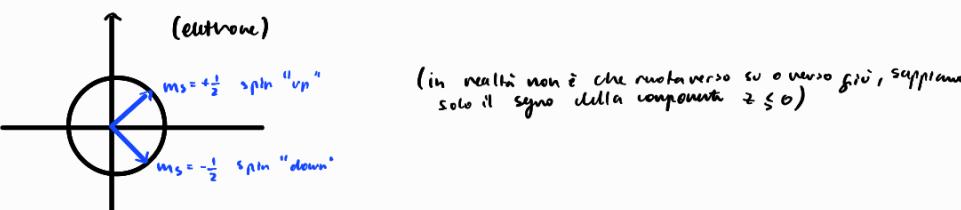
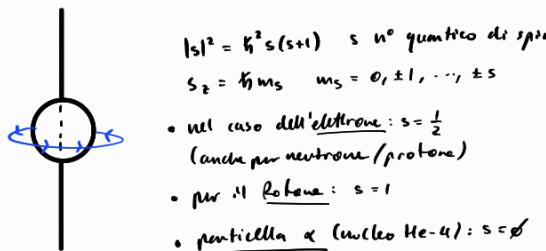
- fissando l'asse z anche L_z è perfettamente det. $\Rightarrow L_z = \hbar m_l$ m_l no quantico: $0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$ (molteplici)

e.s.



Si: momento di spin

- ha le stesse prop. del momento circolare



condizioni delle particelle indistinguibili

• 2

(stato ψ_a)

(stato ψ_b)

1

misurando possono dire che c'è o non c'è una particella, ma non distinguere l'elettrone 1 dall'elettrone 2

$$\Rightarrow \Psi_{ab}(x_1, x_2) = \underbrace{\psi_a(x_1)}_{\text{fenz. d'onda che descrive la 1}} \cdot \underbrace{\psi_b(x_2)}_{\text{nello stato "a", e la 2 nello stato "b"}}$$

fenz. d'onda che descrive la 1
nello stato "a", e la 2 nello stato "b"

sistema le particelle

$$\Rightarrow \Psi_{ab}(x_2, x_1) = \psi_a(x_2) \cdot \psi_b(x_1)$$

$$\text{sono indistinguibili} \Rightarrow |\Psi_{ab}(x_2, x_1)|^2 = |\Psi_{ab}(x_1, x_2)|^2$$

$$\Psi_{ab} \text{ deve essere simmetrica rispetto lo scambio} \Rightarrow \Psi_{ab}(x_1, x_2) = \pm \Psi_{ab}(x_2, x_1)$$

+ BOSONI (fenz. "pari" rispetto lo scambio)

- FERMIONI (fenz. "dispari" rispetto lo scambio)

$\Psi_{ab}(x_1, x_2)$ scritta come prima non rispettava questa simmetria

$$\begin{cases} \Psi_{ab}^+(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_a(x_1)\psi_b(x_2) + \psi_a(x_2)\psi_b(x_1)) = \Psi_{ab}^+(x_2, x_1) \text{ caso "pari" dei Bosoni} \\ \Psi_{ab}^-(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_a(x_1)\psi_b(x_2) - \psi_a(x_2)\psi_b(x_1)) = -\Psi_{ab}^-(x_2, x_1) \text{ caso "dispari" dei Fermioni} \end{cases}$$

$$\Psi_{aa}^-(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_a(x_1) \cdot \psi_a(x_2) - \psi_a(x_2) \cdot \psi_a(x_1)) = \emptyset$$

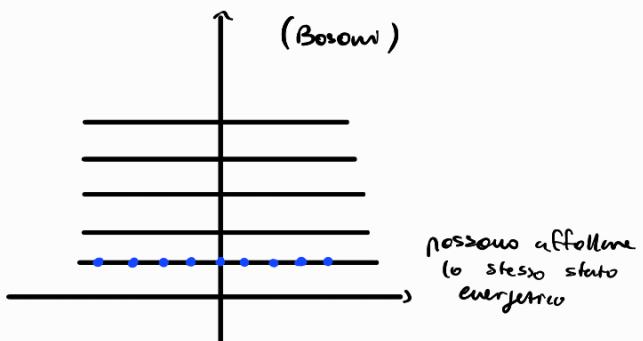
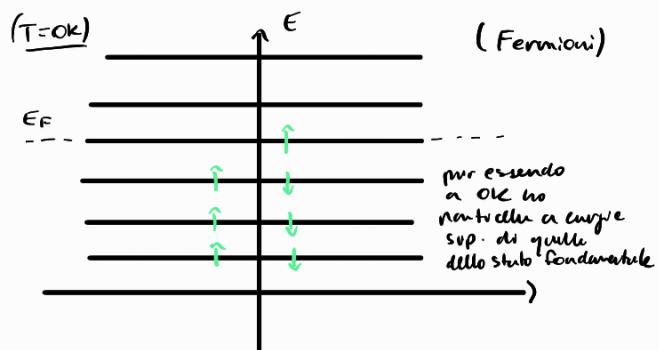
↑
particella 1 e
particella 2
nello stesso stato

\Rightarrow quantisticamente, 2 Fermioni non possono occupare lo stesso stato!

principio di esclusione di Pauli

$$\Psi_{aa}^+(x_1, x_2) \neq \emptyset \Rightarrow \text{non ci applica ai Bosoni}$$

\Rightarrow Bosoni e Fermioni avranno una statistica diversa



avendo degeneraz. di spin, è come se lo stato ha due elettroni

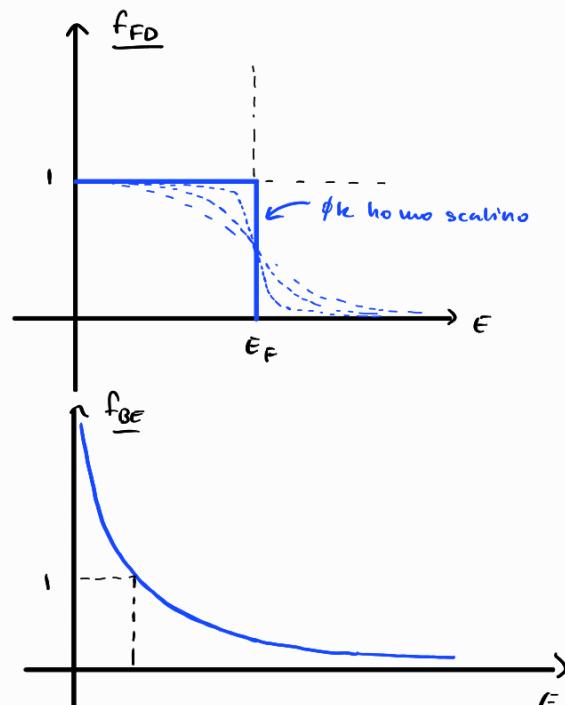
$$f_{FD} = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{kT}} + 1}$$

Fermi Dirac

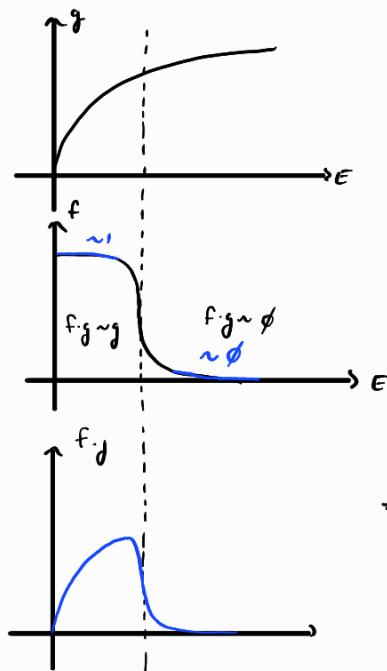
$$f_{BE} = \frac{1}{e^{\frac{E}{kT}} - 1}$$

Bose Einstein

- f_{BE} mi dà il n° medio di elettroni che occupano un certo stato energetico
- nel caso f_{FD} , $0 \leq f_{FD} \leq 1$ (è una probabilità) perché per il principio di esclusione non ho 2 elettroni



caso dei metalli



$$\Rightarrow n = \int_0^{+\infty} f(\epsilon) g(\epsilon) d\epsilon = \int_0^{+\infty} \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{kT}} + 1} \cdot \frac{(2m_n^*)^{3/2}}{2\pi^2 h^3} \sqrt{\epsilon} d\epsilon$$

\uparrow
 $(= E_C)$

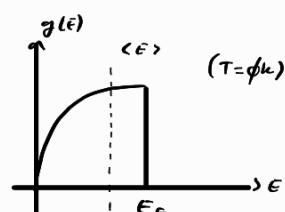
approx. $T = \phi k$ (f scalino) $\Rightarrow \int_0^{E_F} g(\epsilon) d\epsilon$

$$\Rightarrow n = \int_0^{E_F} \frac{(2m_n^*)^{3/2}}{2\pi^2 h^3} \sqrt{\epsilon} d\epsilon = \frac{(2m_n^*)^{3/2}}{2\pi^2 h^3} \cdot \frac{2}{3} E_F^{3/2}$$

$$\Rightarrow E_F = \frac{\hbar^2}{2m_n^*} \cdot (3\pi^2 n)^{2/3}$$

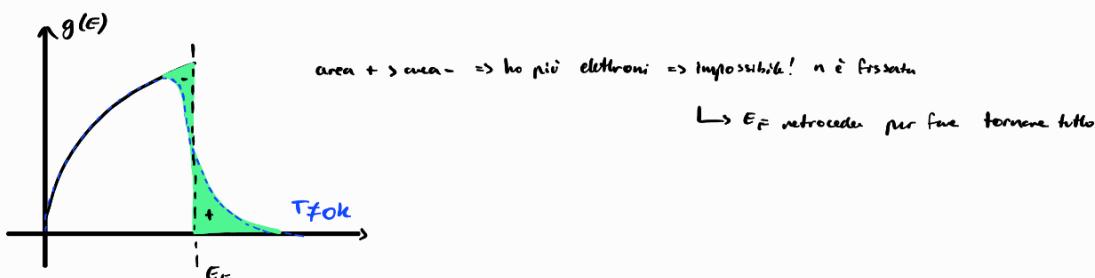
$$\langle E \rangle = \int_0^{E_F} \epsilon g(\epsilon) d\epsilon = \left(\int_0^{E_F} \epsilon \frac{(2m_n^*)^{3/2}}{2\pi^2 \cdot h^3} \sqrt{\epsilon} d\epsilon \right) \cdot \frac{1}{n} = \dots = \frac{3}{5} E_F$$

\uparrow
normalizzo per
n trovato prima,
mentre $g(\epsilon)$ non è
una d.d.p.



pur $T > \phi k$ si trova $\Rightarrow E_F(T) = E_F(T=\phi k) \cdot \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{kT}{E_F(T=\phi k)} \right)^2 \right] < E_F(T=\phi k)$ in generale

se $T \uparrow$, $E_F \downarrow$



	m_n^+/m_e	$n \text{ [cm}^{-3}]$	$E_F(T=0K)$	$E_F(T=300K) \text{ [eV]}$
Li	1,4	$4,6 \cdot 10^{22}$	4,6926	4,6925
Na	0,98	$9,5 \cdot 10^{22}$	3,1251	3,1250
K	0,94	$1,3 \cdot 10^{22}$	2,0209	2,0206
Rb	0,87	$1,1 \cdot 10^{22}$	1,8679	1,8676

$$E_F(T=0K) \sim E_F(T=300K)$$

(approx. a 0K va più che bene)

$m_n^+/m_e \approx 1 \Rightarrow$ elettroni sono praticamente liberi

questo perché hanno energia di ionizzazione bassa, tendono a cedere elettroni (prop. del I° gruppo)

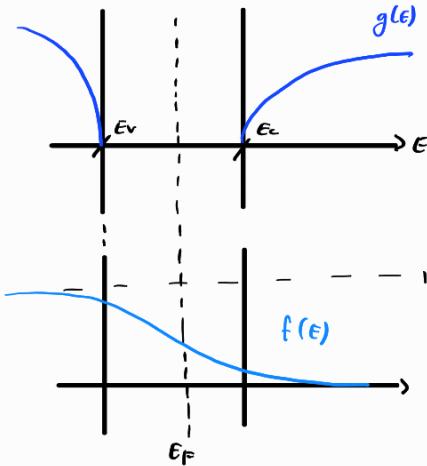
\Rightarrow weak binding ottima appross. per questi elementi

$$n = \int_{E_c}^{\infty} g(E) f(E) dE \quad (\text{per i metalli}, \text{ dove } E_F > E_c)$$

$$g(E) = \frac{(2m_n)^{\frac{3}{2}}}{2\pi^2 h^3} \sqrt{E-E_c} \quad \text{se con approx. parabolica}$$

$$f(E) = \int_{E_c}^{\infty} g(E) f(E) dE \quad \text{si applica a qualsiasi banda, basta esser allequilibrio}$$

caso semiconduttori



$$\bullet \quad E_v < E_F < E_c$$

$$n = \int_{E_c}^{\infty} \frac{(2m_n)^{\frac{3}{2}}}{2\pi^2 h^3} \sqrt{E-E_c} \cdot \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{kT}} + 1} dE \quad \text{integrale di Fermi}$$

(ci sono due valori tabulati)

\Rightarrow approx. MB (Maxwell-Boltzmann)

$$\text{se } E_F \text{ suff. } < E_c \Rightarrow e^{\frac{E-E_F}{kT}} + 1 \sim e^{\frac{E-E_F}{kT}} \quad \text{per suff. grande s'intende } \underbrace{E_c - E_F > 3kT}_{\text{potrebbe fallire per troppo alto, così degenere}}$$

($E > E_c > E_F$)

$$\Rightarrow \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{kT}} + 1} \sim e^{-\frac{E-E_F}{kT}} \quad \text{che è la statistica di Maxwell-Boltzmann}$$

$$\hookrightarrow n \sim \frac{(2m_n)^{\frac{3}{2}}}{2\pi^2 h^3} \int_{E_c}^{\infty} \sqrt{E-E_c} \cdot e^{-\frac{E-E_F}{kT}} dE \quad \text{è risolvibile analiticamente}$$

$$x = \sqrt{\frac{E-E_c}{kT}} \Rightarrow E = x^2 kT + E_c \Rightarrow \frac{dE}{d(x^2)} = kT$$

$$\Rightarrow \frac{(2m_n)^{\frac{3}{2}}}{2\pi^2 h^3} \cdot (kT)^{\frac{3}{2}} \int_0^{\infty} x \cdot e^{-x^2} \cdot d(x^2)$$

$$\int_0^{\infty} x \cdot e^{-x^2} d(x^2) = - \int_0^{\infty} x d(e^{-x^2}) = [-x e^{-x^2}]_0^{\infty} + \int_0^{\infty} e^{-x^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \quad (\int u dv = uv - \int v du)$$

$\left[\frac{d(e^{-x^2})}{d(x^2)} = -e^{-x^2} \right]$

∅

integrale di metà gaussiana

$$\Rightarrow n = \frac{1}{4\pi^3} \left(\frac{2m_n kT}{\pi} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{E_c - E_F}{kT}} \Rightarrow n = n_c e^{-\frac{E_c - E_F}{kT}} \quad \text{con} \quad N_c = \frac{1}{4\pi^3} \cdot \left(\frac{2m_n kT}{\pi} \right)^{\frac{3}{2}}$$

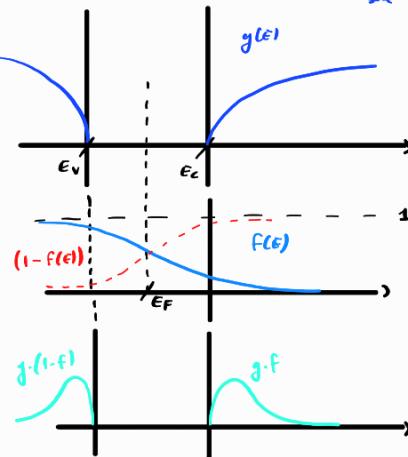
N_c : densità effettiva di stati in banda di conduzione

\hookrightarrow è un num. che tiene conto di tutta la densità di stati disponibili di collaudare tutti gli stati in E_c ($E_F = E_c$)

$$\rho = \int_{-\infty}^{E_V} \frac{(2m_p^*)^{3/2}}{2\pi^2 h^3} \sqrt{E_V - E} \cdot \left(1 - e^{-\frac{E-E_F}{kT}} + 1\right) dE$$

$1 - e^{-\frac{E-E_F}{kT}}$
1 - $F(E)$:
prob. che lo stato
sia vuoto

$$1 - \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{kT}} + 1} = \frac{e^{\frac{E-E_F}{kT}}}{e^{\frac{E-E_F}{kT}} + 1}$$



$$\rho = \int_{-\infty}^{E_V} \frac{(2m_p^*)^{3/2}}{2\pi^2 h^3} \sqrt{E_V - E} \cdot \frac{e^{\frac{E-E_F}{kT}}}{e^{\frac{E-E_F}{kT}} + 1} dE = \int_{-\infty}^{E_V} \frac{(2m_p^*)^{3/2}}{2\pi^2 h^3} \sqrt{E_V - E} \cdot \frac{1}{e^{\frac{E+E_F-E_F}{kT}} + e^{-\frac{E-E_F}{kT}}} dE$$

$E < E_V < E_F \Rightarrow E_F - E_V > 3kT$

$$\rho = \frac{(2m_p^*)^{3/2}}{2\pi^2 h^3} \int_{-\infty}^{E_V} \sqrt{E_V - E} \cdot e^{\frac{E-E_F+E_V-E_V}{kT}} dE$$

$$\rho = \frac{(2m_p^*)^{3/2}}{2\pi^2 h^3} \cdot e^{\frac{E_V-E_F}{kT}} \cdot \int_{-\infty}^{E_V} \sqrt{E_V - E} \cdot e^{\frac{E-E_V}{kT}} dE$$

$$\int_{-\infty}^{E_V} \sqrt{E_V - E} \cdot e^{\frac{E-E_V}{kT}} dE = (kT)^{3/2} \cdot \int_0^\infty x e^{-x^2} dx = (kT)^{3/2} \cdot \underbrace{- \int_0^\infty x e^{-x^2} dx}_{\text{uguale al caso precedente}}$$

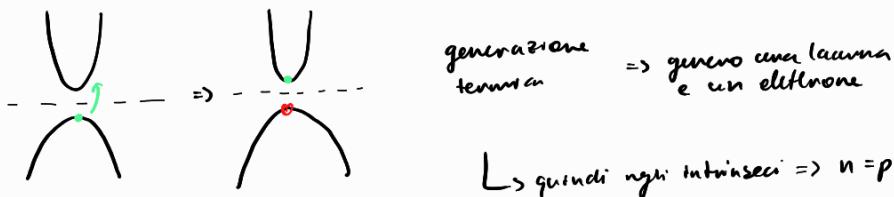
$x = \sqrt{\frac{E_V - E}{kT}} \Rightarrow E = k^2 T^2 - E_V$

$$\rho = \frac{1}{4\pi^2} \cdot \left(\frac{2m_p^* kT}{\pi}\right)^{3/2} e^{\frac{E_V-E_F}{kT}}$$

$$\Rightarrow \rho = N_V \cdot e^{\frac{E_V-E_F}{kT}}$$

con $N_V = \frac{1}{4\pi^2} \left(\frac{2m_p^* kT}{\pi}\right)^{3/2}$

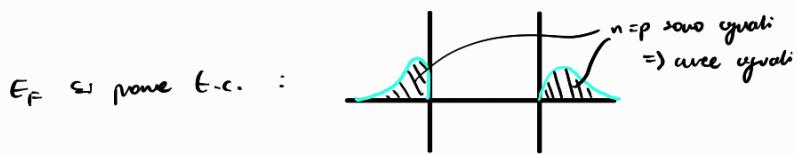
semiconduttori intrinseci:



$$\Rightarrow N_c e^{-\frac{E_C-E_F}{kT}} = N_V e^{\frac{E_V-E_F}{kT}} \Rightarrow e^{\frac{2E_F}{kT}} = \frac{N_V}{N_c} e^{\frac{E_C+E_V}{kT}} \Rightarrow \frac{2E_F}{kT} = \frac{E_C+E_V}{kT} + \log\left(\frac{N_V}{N_c}\right)$$

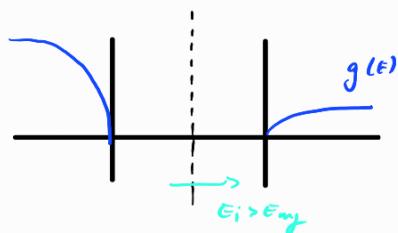
$$\Rightarrow E_F = E_i = \underbrace{\frac{E_C+E_V}{2}}_{E_{hg} \text{ (half-gap)}} + \underbrace{\frac{3}{4} kT \log\left(\frac{m_p^*}{m_n^*}\right)}_{\text{fattore correttivo}}$$

l'errore intrinseco



ma ciò serve il fattore correttivo

per esempio: (GaAs)



se $E_F = E_F$ non si avrebbe $n = p$

popolererebbe in modo simmetrico la BC e la BV \Rightarrow manterà la assimetria della $g(E)$ con pochi elettroni in BC e relativamente tanti in BV

$\hookrightarrow E_F$ si sposta per compensare questo effetto non giungendo $n = p$

$$Ge: \quad E_i = E_F - 3,68 \text{ mV}$$

$$Si: \quad E_i = E_F - 3,17 \text{ mV}$$

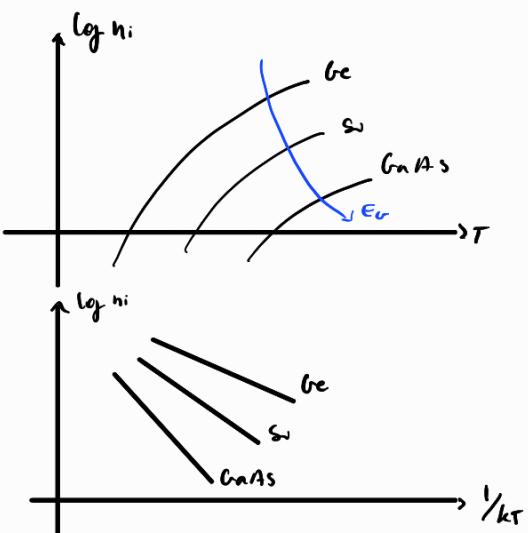
$$GaAs: \quad E_i = E_F + 17,5 \text{ mV}$$

$n = p = n_i$ concentraz. intrinseca

$$\Rightarrow n \cdot p = n_i^2 = N_c \cdot N_v \cdot e^{-\frac{E_F - E_V}{kT}} \Rightarrow n_i = \sqrt{N_c \cdot N_v} e^{-\frac{E_F}{2kT}}$$

non dipende da E_F

\hookrightarrow è indipendente dal drogaggio
(ha validità generale)



$$\log n_i = \log \sqrt{N_c N_v} - \frac{E_F}{2kT}$$

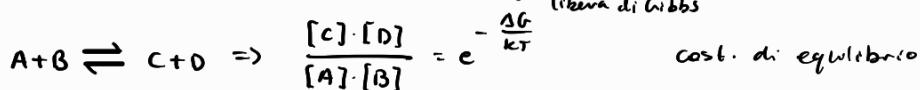
Arrhenius plot

	[eV]	N_c	N_v	[cm ⁻³]
Ge	0,66	$1,03 \cdot 10^{19}$	$5,35 \cdot 10^{18}$	$2,15 \cdot 10^{13}$
Si	1,12	$3,22 \cdot 10^{19}$	$1,85 \cdot 10^{19}$	10^{10}
GaAs	1,42	$4,2 \cdot 10^{17}$	$9,52 \cdot 10^{18}$	$2,42 \cdot 10^6$

legge di azione di massa



diff. di energia
libera di Gibbs



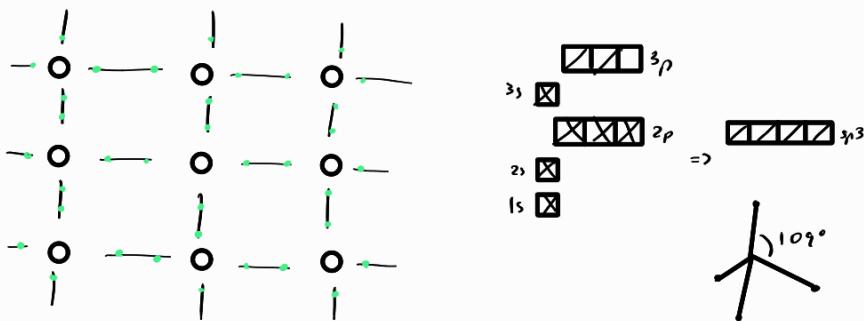
$$\Rightarrow n \cdot p \propto e^{-\frac{E_F}{2kT}} \Rightarrow np = \sqrt{N_c N_v} e^{-\frac{E_F}{2kT}} = n_i^2$$

$$n = N_c e^{-\frac{E_c - E_F}{kT}} = N_c \cdot \underbrace{e^{-\frac{E_c - E_i}{kT}}}_{n_i} \cdot e^{-\frac{E_i - E_F}{kT}} \Rightarrow n = n_i e^{-\frac{E_i - E_F}{kT}} \left(= \frac{n_i^2}{P} \right)$$

$$P = n_i e^{-\frac{E_i - E_F}{kT}}$$

semiconduttore estrinseco

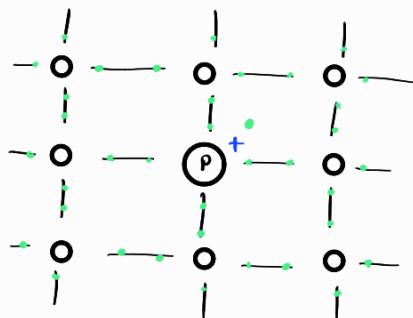
III	IV	V
B	C	N
Al	Si	P
Ga	Ge	As
In	Sn	Sh



Legandosi con gli altri atomi nasce la banda di valenza a 0K

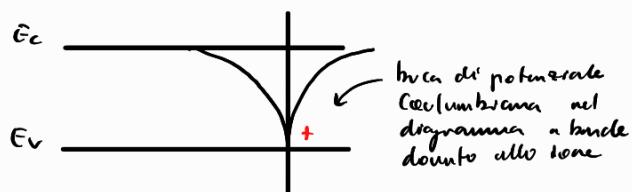
il legame è "dubio" cioè $E_{\text{Frenkel}} > E_{\text{legame}}$ è suff. da condurre ionizzazione per $T > \phi/k$

drogaggio con donatori

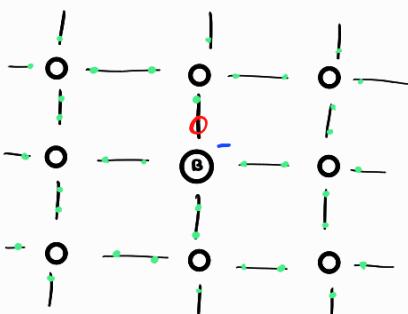


legame Coulombiano tra ione e elettrone debole

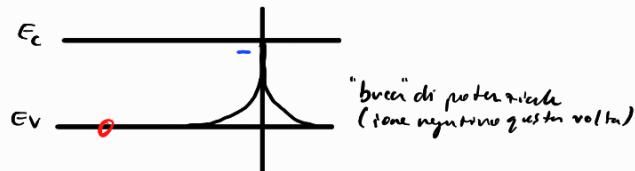
↳ l'elettrone popola la BC (è libero di condurre)



drogaggio con accettori



- legame tra lacuna e donatore debole \Rightarrow lacuna "libera di muoversi" (un elettrone si muove nel buco della lacuna)
- l'elettrone lo perde dalla banda di valenza



- tuttavia questi sono discorsi qualitativi in quanto la concentraz. dei droganti non è sempre totale
- conserviamo la buca Coulombiana, con trattaz. semi-classica. Dove si trovano i livelli?

elettrone che "orbita"
attorno allo ione con
orbita circolare

massa elettronica
in banda di convezione

$$m\alpha = m \frac{v^2}{R} = \frac{1}{4\pi\epsilon} \cdot \frac{q^2}{R^2}$$

↑
E.p. L
(+1mo nel semiconduttore)

$$\Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} m\alpha = m \frac{v^2}{R} = \frac{q^2}{4\pi\epsilon R^2} \quad \text{affermaz. classica} \\ \Delta p \cdot \Delta x = \hbar \quad \text{affermaz. quantistica} \\ \downarrow \\ \text{val. min. del momento} \quad \text{val. min. della posiz.} \\ (p) \quad (R) \end{array} \right.$$

$$\Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} m \frac{v^2}{R^2} \cdot \frac{1}{R} = \frac{q^2}{4\pi\epsilon R^2} \\ mv \cdot R = \hbar \Rightarrow v = \frac{\hbar}{m \cdot R} \end{array} \right. \Rightarrow R = \frac{4\pi\epsilon \hbar^2}{mq^2}$$

$$\sqrt{r_s} = a_0 \text{ raggio di Bohr (se facessi } \langle r_s \rangle \text{ troverei } \langle R \rangle = a_0)$$

\uparrow
salta fuori dalla sol. dell'eq.
di Schrödinger per l'atomo di idrogeno

$$a_0 \sim 0,53 \text{ \AA}$$

fattoria noi stiamo considerando non l'idrogeno bensì un semiconduttore (in part. il silicio)

$$\Rightarrow R = a_0 \cdot \frac{E_r}{m_e/m_i} \text{ fattori correttivi}$$

$$= 0,53 \text{ \AA} \cdot \frac{11,7}{11,7} = 2,4 \text{ nm}$$

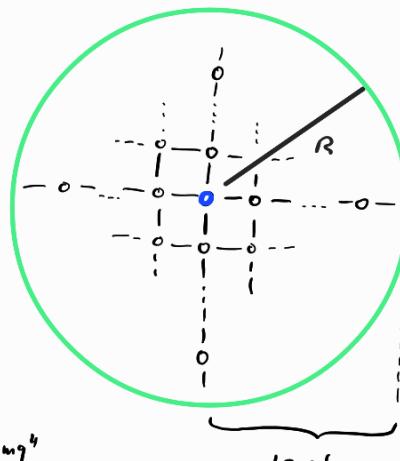
cioè orbita ad almeno 10 atomi di silicio di distanza
rispetto l'atomo attorno alla quale sta orbitando

$$E = \frac{R}{2} \left(\frac{1}{2} m v^2 - \frac{q^2}{4\pi\epsilon R} \right) = E_k + E_{pot}$$

energia kin. energia pot.

$$\Rightarrow E = \frac{R}{2} \cdot m \frac{v^2}{R} - \frac{q^2}{4\pi\epsilon R} = \frac{R}{2} \cdot \frac{q^2}{4\pi\epsilon R^2} - \frac{q^2}{4\pi\epsilon R^2} = \frac{-q^2}{8\pi\epsilon R} \stackrel{R = \frac{4\pi\epsilon \hbar^2}{mq^2}}{=} \frac{-mg^4}{2(4\pi\epsilon h)^2}$$

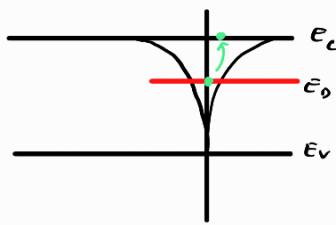
$$\left[m \frac{v^2}{R} = \frac{q^2}{4\pi\epsilon R^2} \right]$$



$$\Rightarrow E = \frac{-mg^2}{2(4\pi\epsilon h)^2} = -R_p \cdot \frac{m^2/m_i}{E_r^2} = -13,7 \cdot \frac{0,126}{11,7^2} = -26 \text{ meV (è una stima)}$$

\downarrow
fattori correttivi

Rydberg: energia dell'orbita
dell'orbitale 1s fondamentale
dell'atomo di idrogeno



energia libera: $E_c - E_f = 26 \text{ meV} \sim$ ordine di grandezza
 $E_{Fermi} @ 300K$

	$ E_f - E_c [\text{eV}]$
Li	0,023
P	0,045
As	0,054
B	0,045
Al	0,067
Ge	0,072
In	0,16

S1: P

$$N_D = 10^{18} \text{ m}^{-3} \quad (\text{sono pochissimi atomi di fosforo rispetto al silicio } 10^{23} - 10^{24} \text{ cm}^{-3})$$

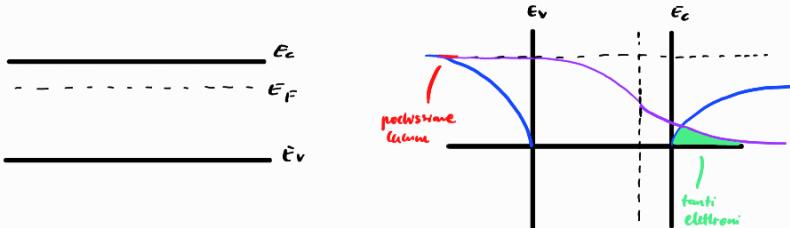
$\hookrightarrow n = N_D$ (tutti i dopanti sono ionizzati)

$$\rho = \frac{n^2}{N_D} \sim \frac{10^{16}}{10^{18}} = 10^2 \text{ cm}^{-3}$$

$$n = N_c e^{-\frac{E_c - E_F}{kT}} \Rightarrow E_F = E_c - kT \log \frac{N_c}{N_D}$$

$= E_c - 80 \text{ meV}$

$\Rightarrow E_c - E_F = 80 \text{ meV} > 3kT \Rightarrow \text{approx. Maxwell-Boltzmann DK}$



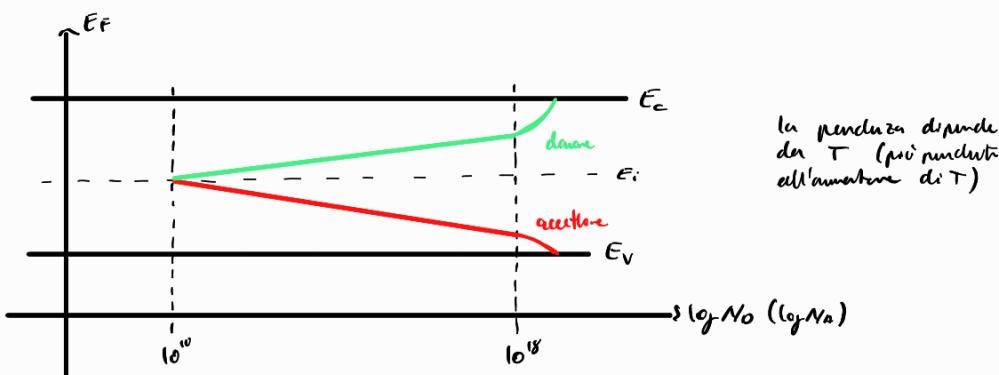
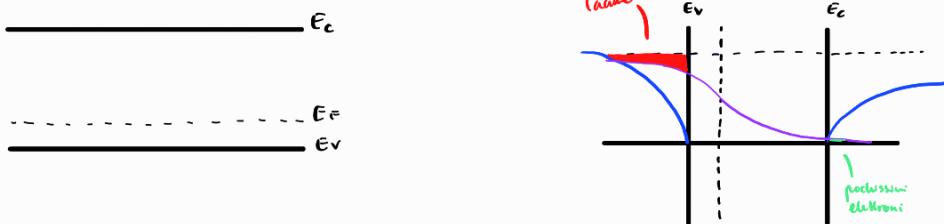
S2: B

$$N_A = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$$

$$\rho = 10^{17} \text{ cm}^{-3} = N_A e^{\frac{E_V - E_F}{kT}}$$

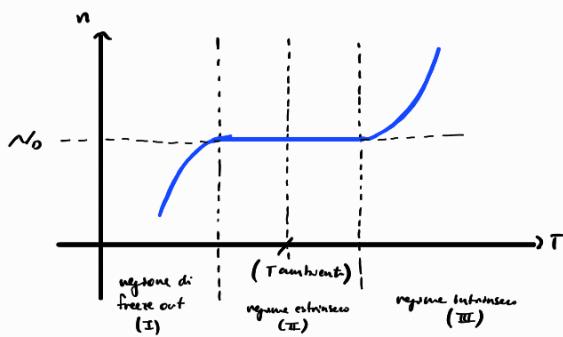
$$n = \frac{n^2}{\rho} \sim 10^3 \text{ cm}^{-3}$$

$$E_F = E_V + kT \log \frac{N_c}{N_A} = E_V + 10 \text{ meV}$$

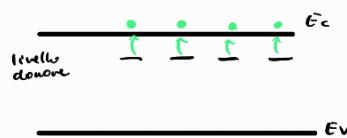


da $\sim 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ in poi non ha più andamento lineare (non vale più l'approx. MB), e verso $\sim 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ appross. casi d'equilibrio

per $N_D \sim 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ sto aggiungendo lo stesso n° di elettroni o meno di quanti ce ne sono già nel silicio intrinseco

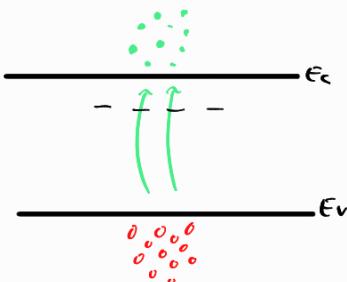


regione (II) (straz. "normali")



energia termica è suff. da fornire tutte i donatori

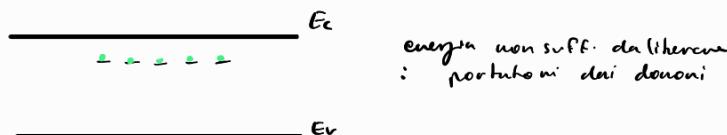
(III)



per T suff. grande prevale la concentraz. di portatori dovuti alla generazione rispetto ad inganno

$$n_i = \sqrt{N_c N_v} e^{-\frac{E_g}{2kT}} \gg N_0$$

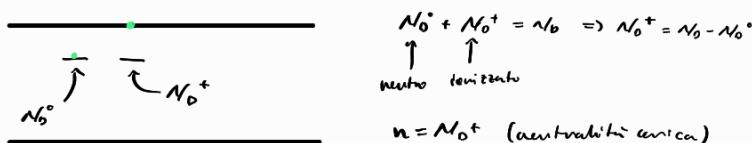
(I)



energia non suff. da liberare
i portatori dei donatori

regione I/II

(T relativamente bassa)



$$N_0^0 + N_0^+ = n/b \Rightarrow N_0^+ = N_0 - N_0^0$$

↑ ↑
neutro ionizzante

$$n = N_0^+ \text{ (neutralità carica)}$$

Hp: vale la statistica di Fermi-Dirac per il livello donore. È abbastanza plausibile, tuttavia con qualche accortezza, perché quando l'elettrone trova un donore vede due stati possibili energetici ($\uparrow \downarrow$). Però, la forza repulsiva Coulombiana non permette che si leghi un secondo elettrone (insioma non posso considerare il livello donore proprio come la banda di conduzione)

$$\Rightarrow \begin{cases} n = N_c e^{-\frac{E_c - E_F}{kT}} \\ N_0^+ = N_0 - N_0^0 = N_0 - N_0 \cdot \frac{1}{\frac{1}{2} e^{\frac{E_0 - E_F}{kT}} + 1} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} n = N_c e^{-\frac{E_c - E_F}{kT}} \\ N_0^+ = \frac{N_0 \cdot \frac{1}{2} e^{\frac{E_0 - E_F}{kT}}}{\frac{1}{2} e^{\frac{E_0 - E_F}{kT}} + 1} = \frac{N_0}{1 + 2 e^{-\frac{E_0 - E_F}{kT}}} \end{cases}$$

È fattore correttivo

$$n = N_0^+ = \frac{N_0}{1 + 2 e^{-\frac{E_0 - E_F}{kT}}} = \frac{N_0}{1 + 2 \frac{N_c}{N_c} e^{-\frac{E_0 - E_F + E_c - E_c}{kT}}} = \frac{N_0}{1 + 2 \frac{N_c}{N_c} e^{-\frac{E_0 - E_F}{kT}} e^{-\frac{E_c - E_c}{kT}}} \Rightarrow N_c' = \frac{1}{2} N_c e^{-\frac{E_c - E_0}{kT}} (\sim n a N_c)$$

$$\Rightarrow n = \frac{N_0}{1 + \frac{n}{N_c'}} \Rightarrow n^2 + N_c' n - N_c' N_0 = 0 \Rightarrow n = -\frac{N_c'}{2} + \sqrt{\left(\frac{N_c'}{2}\right)^2 + N_c' N_0}$$

(signo scartato, non ha senso fisicamente)

$$\Rightarrow n = \frac{N_c'}{2} \left[\sqrt{1 + \frac{4N_D}{N_c'}} - 1 \right]$$

* per T alta, $N_c' \gg N_D \Rightarrow n \sim \frac{N_c'}{2} \left(1 + 2 \frac{N_D}{N_c'} - 1 \right) = N_D$ (II) $\left[(1 + f(x))^c - 1 \sim c \cdot f(x) \text{ per } x \rightarrow 0 \text{ relaz. asintotica} \right]$

$$\hookrightarrow E_F = E_C - kT \log \frac{N_c}{N_D}$$

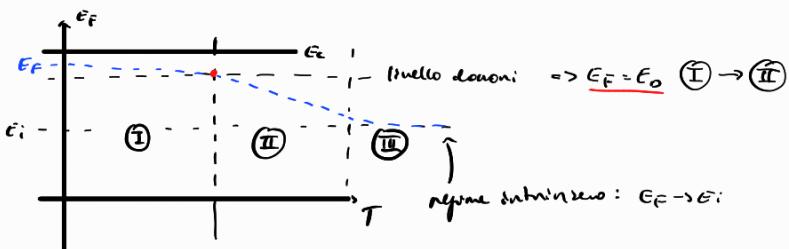
* per T bassa, $N_c' \ll N_D \Rightarrow n \sim \sqrt{N_D \cdot N_c'} = \sqrt{\frac{N_D N_c}{2}} \cdot e^{-\frac{E_C - E_D}{2kT}} \xrightarrow{T \rightarrow 0}$ (I)

$$\hookrightarrow E_F = E_C - kT \log \left[\frac{N_c}{\sqrt{\frac{N_D N_c}{2}}} \cdot e^{\frac{E_C - E_D}{2kT}} \right] = E_C - kT \log \left(\sqrt{\frac{2N_c}{N_D}} \right) - \frac{E_C - E_D}{2} \Rightarrow E_F = \frac{E_C + E_D}{2} - \frac{kT}{2} \log \left(\frac{2N_c}{N_D} \right)$$

Il livello di Fermi è tra il livello donatore e la banda di conduzione.

* $n \sim N_D$ tutti i donatori ionizzati (II)

* $n = 0$ freeze out (I)



$$P = \frac{N_V'}{2} \left(\sqrt{1 + \frac{4N_D}{NV}} - 1 \right)$$

$$N_V' = \frac{N_V}{4} \cdot e^{\frac{E_V - E_A}{kT}}$$

↳ dipendenza delle buone di valenza (burden legge) \Rightarrow ho un vantaggio fattore 2 e pesanti)

(III)

$$N_D^+ + p = N_A^- + n \quad (\text{neutralità di carica})$$

N_D

N_A

dipinti completamente ionizzati ($\text{H}_{\text{e}}, T \gg T_{\text{ionizzazione}}$)

$$\Rightarrow N_D + p = N_A + n \Rightarrow N_D + \frac{n^2}{n} = N_A + n \Rightarrow n^2 - (N_D - N_A)n - n^2 = 0$$

$$\Rightarrow n = \frac{N_D - N_A}{2} + \sqrt{\left(\frac{N_D - N_A}{2}\right)^2 + n_i^2}$$

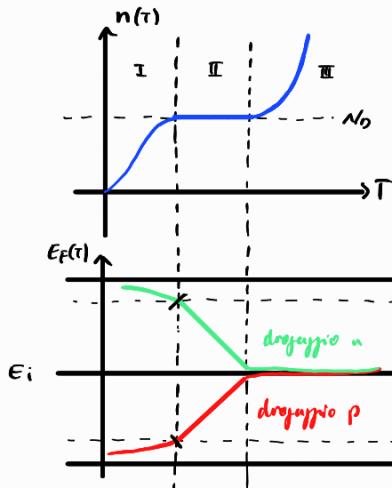
[contributo dovuto agli elettroni intrinseci, non più trascurabile per T suff. grandi]

$$(n_i = \sqrt{N_A N_D} \cdot e^{-\frac{E_F}{2kT}})$$

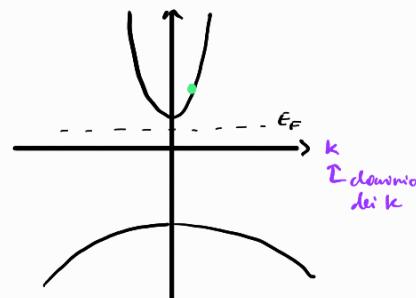
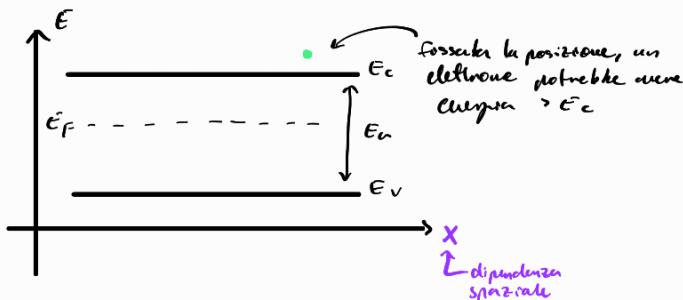
$$\propto \sqrt{(T)^{\frac{3}{2}} \cdot (1)^{\frac{3}{2}}} \cdot e^{-\frac{E_F}{2kT}} \propto (T)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{E_F}{2kT}}$$

$\hookrightarrow n = \rho \sim n_i$

(nella regione (II) intrinseca, $N_D - N_A \gg n_i$ quindi $n \approx N_D - N_A$)



vediamo adesso la dipendenza spaziale:



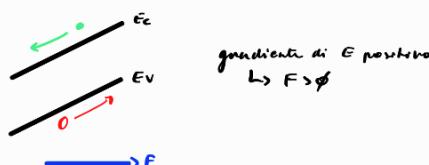
$$E_{\text{TOT}} = E_C + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_h} \quad ; \quad E_{\text{TOT}} = E_V - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_p}$$

Epot. Ecin.

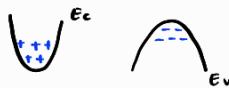
↳ quando applichiamo un campo, o introduciamo cariche fisse, modifichiamo E_C, E_V (energia potenziale)

$$V = \text{potenziale} \quad (\text{non energia potenziale}) = -\frac{1}{q} E_C$$

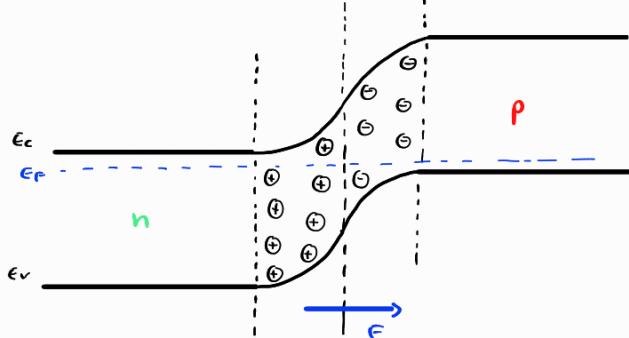
$$\Rightarrow F = -\frac{dV}{dx} = \frac{1}{q} \frac{dE_C}{dx} \quad (F = -\nabla V)$$



$$f = \epsilon \frac{dF}{dx} = \epsilon \frac{d^2E_c}{dx^2}$$



la concavità indica la presenza di carica fissa $\leq \phi$



$$J_{\text{drift}} = qn\mu_n F + qp\mu_p F \quad (\text{normalmente prevale un contributo sull'altro})$$

$$\mu_n = \frac{qT_m}{m_n^*} ; \quad \mu_p = \frac{qT_m}{m_p^*}$$

$$T_m \sim 10^{-13} \text{ s} \quad (\text{tempo medio di rilassamento})$$

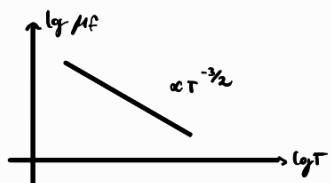
	m_n^*/m_0	$\mu_n [\text{cm}^2/\text{V.s}]$	μ_p
Ge	0,12	3800	1900
Si	0,26	1360	460
GaAs	0,067	8000	1900

Se cambia il drogaggio, e la temp., allora cambia la mobilità perché cambia T_m

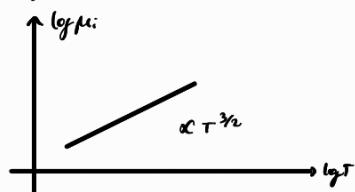
scattering → fenome
impurità ionizzata

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{\mu_f} + \frac{1}{\mu_i}$$

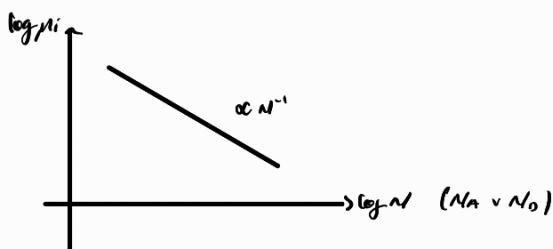
↑ limitata dai fenomeni ↑ limitata dagli eoni:



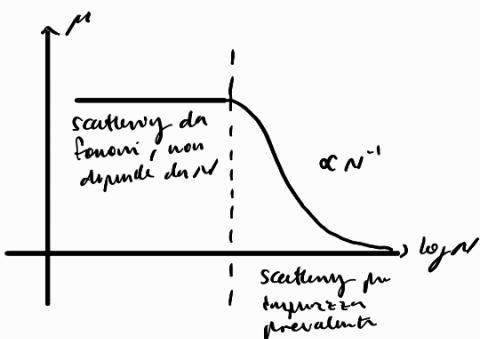
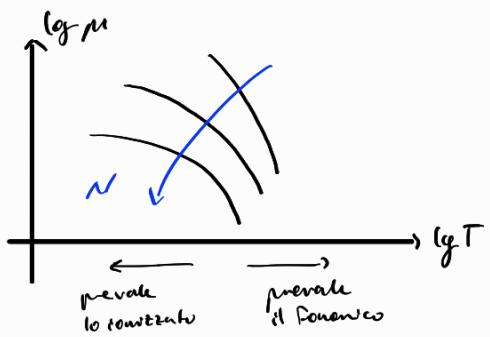
aumenta T, ha più vibraz. \Rightarrow più fenomeni



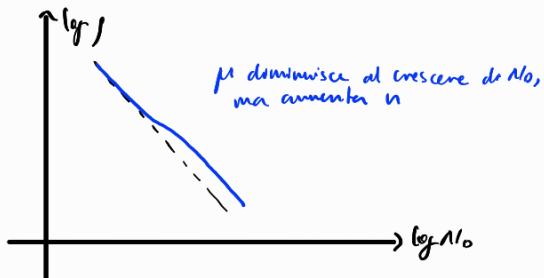
al crescere di T, l'elettrone si muove con velocità v_{th} sempre più veloce, "sfreccia" davanti allo zane e va insieme sempre di meno



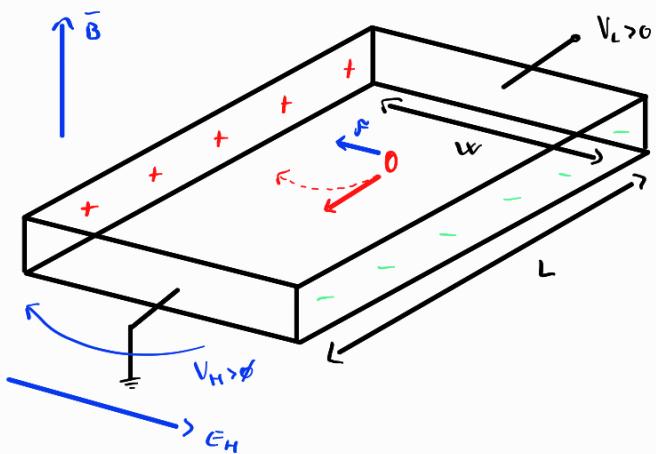
tutti questi effetti coesistono

\Rightarrow 

$$\rho = \frac{1}{\sigma} = \frac{1}{q n \mu n} \quad \text{resistività}$$



effetto Hall



$$F_{\text{Lorentz}} = qv \times \vec{B} \quad (-q \text{ se corredano un elettrone})$$

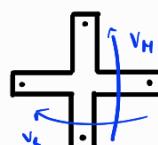
a regime raggiunge un equilibrio tra forza di Lorentz e forza elettrica del campo E_H
 \Rightarrow a negare le cariche vanno dritte

$$\Rightarrow qvB = qE_H$$

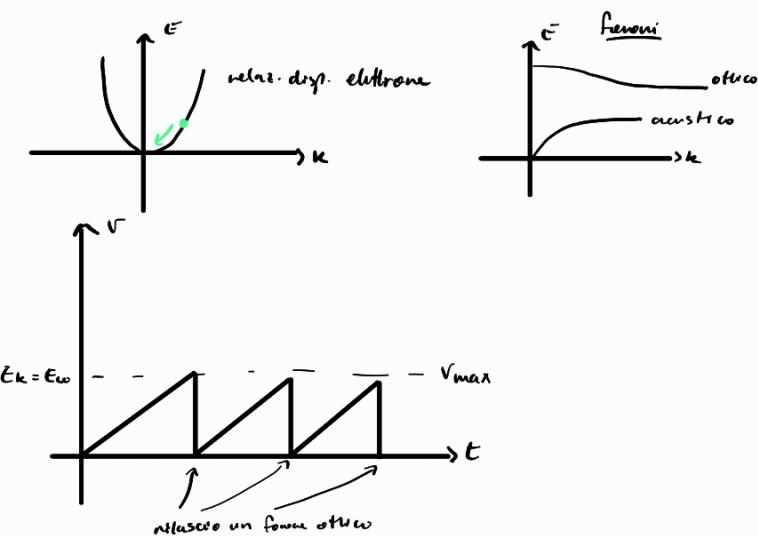
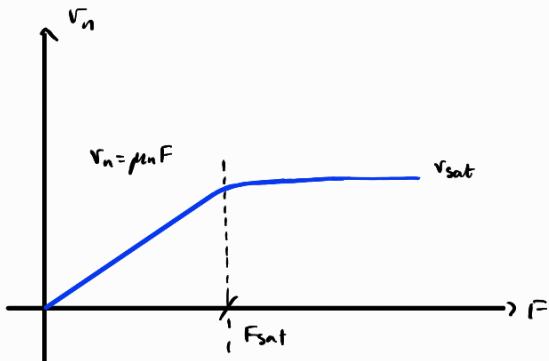
$$\Rightarrow q\mu_p \frac{V_L}{L} B = q \frac{V_H}{w}$$

$$\hookrightarrow \mu_p = \frac{1}{B} \cdot \frac{V_H}{L} \cdot \frac{L}{w} \quad \text{trovo } \mu_p \text{ in funz. di quantità che conosco o posso misurare}$$

$$J = qP\mu_p F \Rightarrow P = Na = \frac{J}{q\mu_p v_e} \quad \text{posso anche misurare il dragaggio}$$



Velocità di saturazione.



il fonone acustico mi farà lasciare la qt. di moto ma non mi fa perdere energia

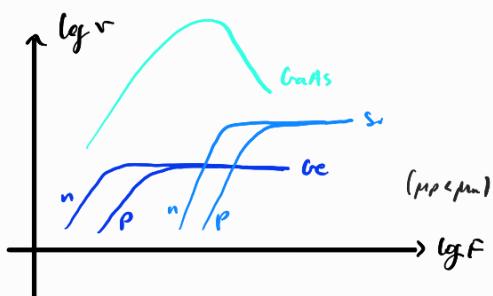
per campi grandi, ho scattering per fononi ottici (dato che l'elettrone ha suff. energia da rilasciare sotto forma di fononi ottici), quindi l'elettrone perde velocemente energia e satira di conseguenza la sua velocità

$$E = \hbar \omega_{co} = 37 \text{ meV} \quad (\text{ce}) \quad \text{energie non trascurabili}$$

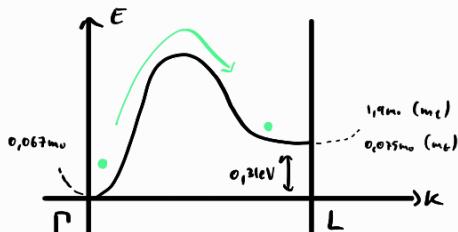
\uparrow
logaritmata ottica (63 meV si.)

$$\frac{1}{2} m_n^* v_{max}^2 = \hbar \omega_{lo} \Rightarrow v_{max} = \sqrt{\frac{2\hbar\omega_{lo}}{m_n^*}} \Rightarrow v_{sat} = \langle v \rangle = \frac{v_{max}}{2} \approx V_{th} \approx 10^3 \text{ cm/s} @ T_{ambiente}$$

$$F_{sat} = \frac{v_{sat}}{\mu_n}$$

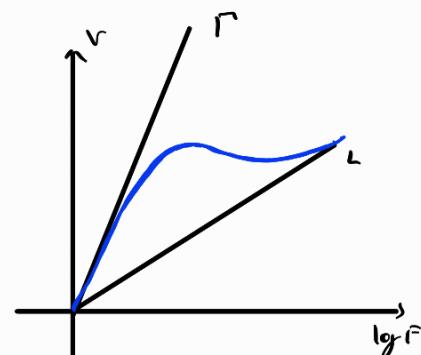


L'andamento del GaAs dovuto allo scattering intervalle

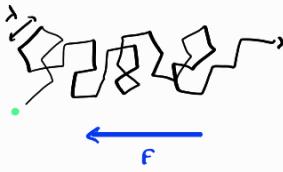


per campi F suff. grandi l'elettrone oltre rilasciare un fonone può popolare le altre valle \Rightarrow acquisisce una massa molto più grande

L_s crolla per



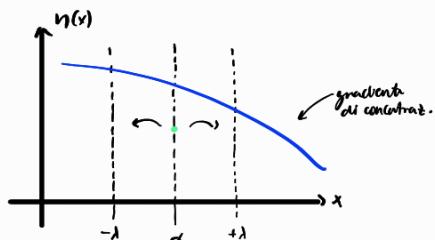
diffusione



$$\frac{1}{2} m V_{th}^2 = \frac{3}{2} kT \Rightarrow V_{th} = \sqrt{\frac{3kT}{m}} \approx 10^7 \text{ cm/s} \quad (= v_{sat})$$

ogni τ_m subisce scattering

$$\Rightarrow \lambda = \text{mean free path} = V_{th} \cdot \tau_m \approx 10 \text{ nm}$$



In un tempo τ_m $\frac{1}{2}$ vanno a dx e $\frac{1}{2}$ vanno a sx

$$\phi^+ = \frac{1}{2} n\left(-\frac{1}{2}\right) \cdot V_{th} \quad (\text{flusso verso dx})$$

$$\phi^- = \frac{1}{2} n\left(\frac{1}{2}\right) \cdot V_{th} \quad (\text{flusso verso sx})$$

$$n\left(-\frac{1}{2}\right) > n\left(\frac{1}{2}\right) \Rightarrow \phi^+ > \phi^- \quad \text{flusso netto verso dx}$$

(se $n = \text{cost.}$ non avrei flusso netto in nessuna direz.)

$$\Rightarrow \phi = -\frac{1}{2} V_{th} \left[n\left(\frac{1}{2}\right) - n\left(-\frac{1}{2}\right) \right] = \phi^+ - \phi^-$$

$$= -\frac{1}{2} V_{th} \left[n(0) + \frac{\partial n}{\partial x} \cdot \frac{1}{2} - n(0) + \frac{\partial n}{\partial x} \cdot \frac{1}{2} \right]$$

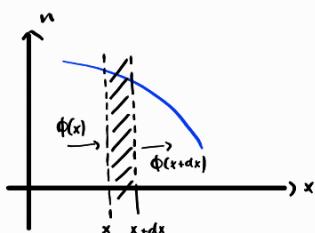
$$\Rightarrow \phi = -\frac{1}{2} V_{th} \cdot \lambda \cdot \frac{dn}{dx} \Rightarrow \phi = -D_n \nabla n \quad \text{I° legge di Fick}$$

diffusione nel verso opposto del gradiente di concentraz.

$$V_{th} = \frac{\lambda}{\tau_m} \quad \frac{1}{2} m^* V_{th}^2 = kT \text{ per semplicità}$$

$$D_n = \frac{1}{2} V_{th} \lambda = \frac{1}{2} V_{th}^2 \cdot \tau_m \quad \frac{q \tau_m}{m^*} = \mu$$

$$\Rightarrow D_n = \frac{kT}{q} \mu_n \quad \text{legge di Einstein}$$



$$-D_n \frac{\partial n}{\partial x} = \underbrace{-D_n \frac{\partial n}{\partial x} + \frac{\partial \phi}{\partial x} \cdot dx}_{\text{conservaz. necess.}} + \frac{\partial \phi}{\partial x} \cdot dx$$

$$\Rightarrow \frac{\partial n}{\partial t} = D_n \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} \quad \text{II° legge di Fick}$$

$$\Rightarrow \frac{\partial n}{\partial t} = D_n \partial_x^2 n$$

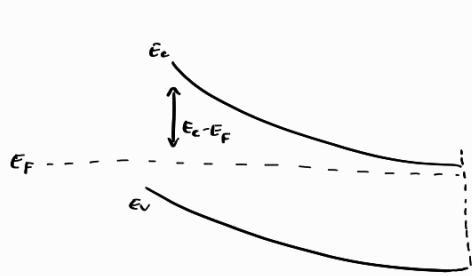
currente di drift

currente di diffusione

$$J_n = q \mu_n F + q D_n \frac{\partial n}{\partial x}$$

$$J_p = q P M_p F - q D_p \frac{\partial p}{\partial x}$$

Supponiamo di avere il seguente andamento delle bande:



$$n = N_c e^{-\frac{(E_C - E_F)}{kT}}$$

$$\Rightarrow E_C = E_F - kT \log \frac{n}{N_c}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} J_n = q n \mu_n F + q D_n \frac{dn}{dx} = \phi \quad (\text{siamo all'eq.}) \\ F = \frac{1}{q} \cdot \frac{dE_C}{dx} = -\frac{kT}{q} \cdot \frac{1}{n} \cdot \frac{dn}{dx} \end{array} \right.$$

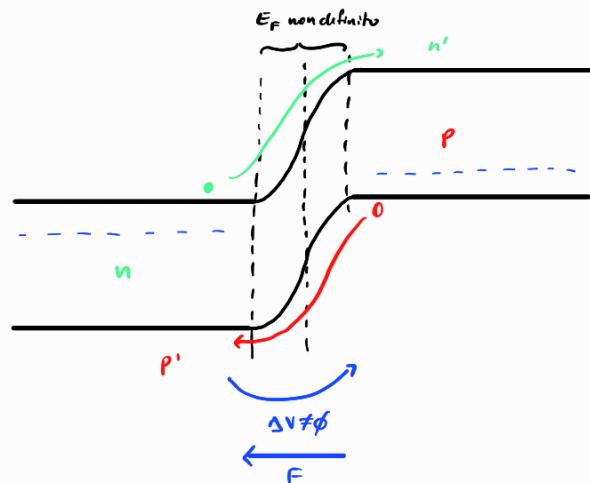
$$\Rightarrow J_n = -q \mu_n \frac{kT}{q} \frac{1}{x} \cdot \frac{dn}{dx} + q D_n \frac{dn}{dx} = 0$$

$$\Rightarrow D_n = \mu_n \frac{kT}{q} \quad \text{legge di Einstein riveduta in modo più rigoroso}$$

Livelli da quasi Fermi

all'equilibrio ho un unico livello di Fermi che mi determina n, p

fuori equilibrio:

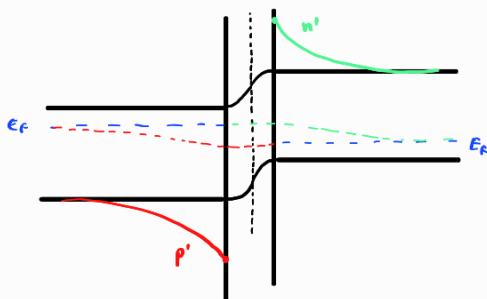


ccesso dovuto all'iniezione

$$n = n_0 + n' = \frac{n_i^2}{p_0} + n' ; \quad p = p_0 + p' = \frac{n_i^2}{n_0} + p'$$

elettroni minoritari all'eq. in zona p

livelli di quasi-Fermi:



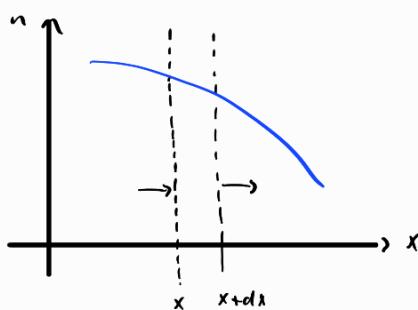
$$F_n \text{ t.c. } n = n_0 + n' = N_c e^{-\frac{E_c - E_n}{kT}}$$

$$F_p \text{ t.c. } p = p_0 + p' = N_v e^{\frac{E_v - E_p}{kT}}$$

(fuori equilibrio!)

$$(n = n_i e^{-\frac{E_n - E_i}{kT}} ; p = n_i e^{-\frac{E_i - F_p}{kT}})$$

continuità della corrente



$$\begin{aligned} \frac{\partial n}{\partial t} \cdot dx &= \underbrace{-\frac{J_n(x)}{q}}_{\text{flusso entranti}} + \underbrace{\frac{J_n(x+dx)}{q}}_{\text{flusso uscenti}} \\ &= -\frac{J_n(x)}{q} + \frac{J_n(x)}{q} + \frac{1}{q} \frac{\partial J_n(x)}{\partial x} \cdot dx \\ \Rightarrow \frac{\partial n}{\partial t} &= \frac{1}{q} \frac{\partial J_n}{\partial x} = \frac{1}{q} \frac{\partial}{\partial x} \left(q n \mu_m F + q D_n \frac{\partial n}{\partial x} \right) \end{aligned}$$

eq. di diffusione dei minoritari

Hip.

$$\begin{cases} * F \neq 0 & (\text{per esempio a ridosso della zona di saturazione}) \\ * n, p_0 \text{ uniformi} & (\text{non c'è un profilo di droghaggio}) \\ * \text{dibole iniezione} & (n' \ll N_A = p_0, p' \ll n_0 = n_0, \text{ cioè: minoritari maggioranza minoritari}) \end{cases}$$

$$\Rightarrow \frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left(q n \mu_m F + q D_n \frac{\partial n}{\partial x} \right) = D_n \frac{\partial^2 n}{\partial x^2}$$

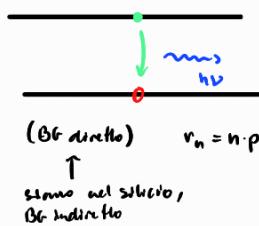
$F = \phi$

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D_n \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} + g_n - r_n$$

↑
rate di generaz.
e riassorb.

considero anche i contributi di g_n e r_n

ricombinaz. radiativa

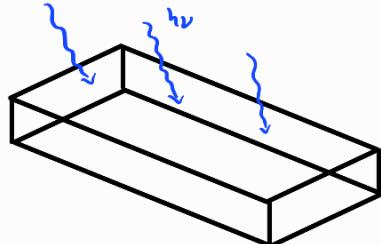


$$\frac{\partial(n_0 + n')}{\partial t} = D_n \frac{\partial^2(n_0 + n')}{\partial x^2} + g_n - \frac{n'}{T_m}$$

no cost. (per hp.)

$$\Rightarrow \frac{\partial n'}{\partial t} = D_n \frac{\partial^2 n'}{\partial x^2} + g_n - \frac{n'}{T_m}$$

e analogamente $\frac{\partial p'}{\partial t} = D_p \frac{\partial^2 p'}{\partial x^2} + g_p - \frac{p'}{T_m}$ (n', p' minoritari)



$h\nu$ uniforme, g_n uniforme

$$\Rightarrow \frac{\partial n'}{\partial t} = D_n \frac{\partial^2 n'}{\partial x^2} + g_n - \frac{n'}{T_m} \Rightarrow n' = g_n T_m$$

considero all'equilibrio regime irradimento uniforme

$$n' = 10^{15} \text{ cm}^{-3} \quad g_n \sim 10^{20} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1} \quad T_m \sim 10^{-5} \text{ s}$$

$(p' = 10^{15} \text{ cm}^{-3})$

$n' p' \ll N_A, N_D$ ok

$n' p'$ trascurabili rispetto $N_A, N_D \Rightarrow p \sim p_0, n \sim n_0 \Rightarrow E_F \sim F_n, F_p$

Spostiamo la luce:

$$\frac{\partial n'}{\partial t} = D_n \frac{\partial^2 n'}{\partial x^2} + g_n - \frac{n'}{T_m} \Rightarrow \frac{\partial n'}{\partial t} + \frac{1}{T_m} \cdot n' = \phi$$

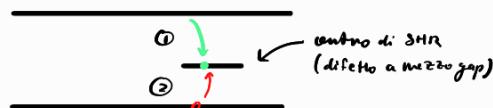
(ho un transitorio) irrad. uniforme spostata luce

$$\Rightarrow \lambda + \frac{1}{T_m} = 0 \Rightarrow \lambda = -\frac{1}{T_m} \Rightarrow n'(t) = A \cdot e^{-\frac{1}{T_m} t}$$

$$A = n'(0) = g_n T_m$$

$$\Rightarrow n'(t) = n'(0) e^{-\frac{1}{T_m} t}$$

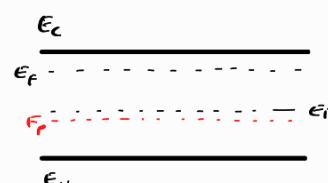
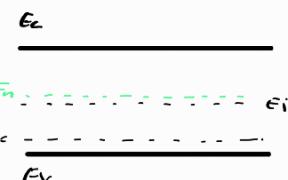
ricombinaz. Shockley-Hall-Reed

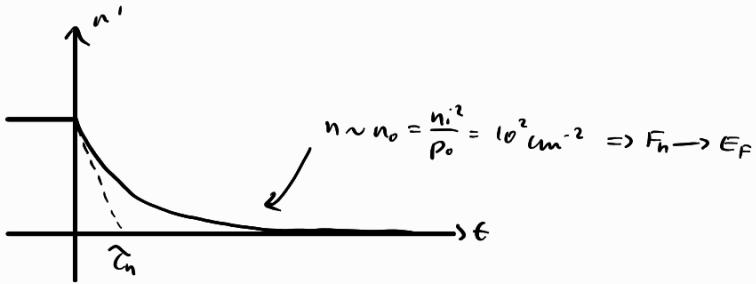


bottleneck nel primo passaggio. Ho pochi elettroni minoritari; e tanti buoni maggioritari $\Rightarrow r_n = \frac{n'}{T_m}$

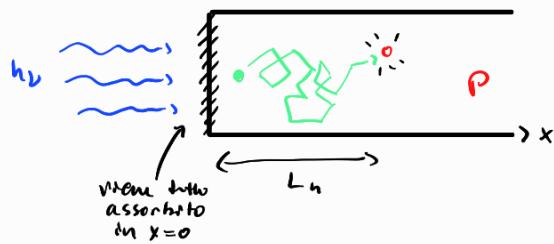
T_m tempo di ricomb.
elettroni minoritari

$(n', p'$ minoritari)





caso disuniforme



$$\frac{\partial n'}{\partial t} = D_n \frac{\partial^2 n'}{\partial x^2} + g_n - \frac{n'}{L_n} \Rightarrow D_n \frac{\partial^2 n'}{\partial x^2} - \frac{1}{L_n} \cdot n' = 0$$

condiz. a regime
no gen. solo in $x=0$

$$D_n \lambda^2 - \frac{1}{L_n} = 0 \Rightarrow \lambda^2 = \frac{1}{D_n L_n} \Rightarrow \lambda = \pm \frac{1}{L_n}$$

l'oggetto di diffusione: è una sorta di misura della distanza media percorsa da un elettrone prima di ricombinare

$$\Rightarrow n'(x) = A e^{\frac{x}{L_n}} + B e^{-\frac{x}{L_n}} \quad B = n'(0)$$

$A=0$: condit.
al contorno
che $n'(\infty)=0$

$$\Rightarrow n'(x) = n'(0) e^{-\frac{|x|}{L_n}}$$

