

Fisica dei materiali per l'Elettronica

Smargiatura della fisica classica

Verso la fine del XIX secolo, la fisica era formata da due branche: la meccanica di Newton, e l'elettromagnetismo di Maxwell. Le due teorie, incompatibili tra loro, non spiegavano alcuni tipi di fenomenologie: fenomeni di tipo termodynamico, subatomico, ed altri, risultavano inspiegabili. L'incompatibilità tra le due "fisiche", inoltre, le leggi fisiche, non risultavano invarianti nei vari sistemi di riferimento inertiali: in due sistemi di riferimento inertiali, non valevano infatti le stesse leggi fisiche. Vennero introdotte tre fondamentali branche:

- 1) Relatività: risolve le incompatibilità tra meccanica ed elettromagnetismo per trasformazioni di sistemi di riferimento inertiali (relatività ristretta), e poi qualunque (relatività generale)
- 2) Meccanica statistica: applicazione della statistica alla meccanica, per lo studio di sistemi di molte particelle.
- 3) Meccanica quantistica: generalizzazione della fisica classica, basata sullo studio a livello subatomico e atomico della materia.

Ci focalizzeremo soprattutto sulle branche 2 e 3; tuttavia, metta un breve accenno sulle trasformazioni di Lorentz: prima dal 1904 - 1905, venivano usate, per la meccanica, le trasformazioni di Galileo;

$$\begin{cases} x' = x - vt \\ y' = y \\ z' = z \\ t' = t \end{cases}$$

Queste trasformazioni considerano la possibilità di una velocità infinita; il tempo è una misura assoluta, come anche lo spazio.

Venne poi introdotto le trasformazioni di Lorentz:

$$\begin{cases} x' = \gamma \left(x - \frac{vt}{c^2} \right) \\ y' = \frac{y}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \\ z' = z \\ t' = \gamma \left(t - \frac{vx}{c^2} \right) \end{cases}$$

Questa trasformazione tiene conto di un limite finito: la velocità della luce c . Tempo e spazio non sono assoluti, ma si adattano alla velocità del sistema di riferimento. Si noti che, per $v \ll c$, le trasformazioni di Lorentz tendono a coincidere con quelle di Galileo.

Analizziamo ora un problema non spiegabile classicamente, per dimostrare l'inadeguatezza della fisica classica.

Problema del corpo nero.

Se il corpo nero è una cavità la cui pareti si trovano in equilibrio ad una temperatura T con la radiazione elettromagnetica al suo interno.

Classicamente, possiamo pensare ad un atomo come un dipolo; investendolo con radiazione elettromagnetica, i baricentri di carica positive e negative tendono a spostarsi ed allontanarsi tra loro.

Ciò implica che, scaldando il corpo, faccio saltare i dipoli e

quindi genero onde elettromagnetiche di frequenza proporzionale all'aumento di temperatura: la frequenza è infatti la stessa frequenza di vibrazione del dipolo, causata dall'aumento di T . Cerchiamo di interpretare classicamente il problema: consideriamo la radiazione elettromagnetica come formata da due componenti: una progressiva ed una regressiva.

$$E(x; t) = A_1 e^{i(Kx - \omega t)} + A_2 e^{i(Kx + \omega t)}$$

Consideriamo, come condizioni al contorno, le seguenti:

$$E(0; t) = E(L; t) = 0: \text{ poiché l'onda è riflessa, in prossimità dei bordi il campo è nullo.}$$

Ottieniamo:

$$A_2 = A_1; K_x = \frac{m \pi \frac{\pi}{L}}{L}, \text{ con } m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Dunque,

$$I(v) dv = (kT) dN; dN = \frac{dN}{dK} \cdot \frac{dK}{dV} = 2 \cdot \frac{4\pi L^3}{c^3} v^2 dv$$

$$I(v) = 2 \cdot \frac{4\pi L^3}{c^3} v^2 kT. \quad v = \text{frequenza dell'onda.}$$

All'aumentare di v , dovrebbe aumentare l'intensità I , T , ecc.

Prevediamo dunque curve del tipo, fissato un T_0 ,



(quelle che però si ottengono sperimentalmente, sono curve a campana, come quella mostrata).

In realtà, vedremo che l'energia del corpo non cambia secondo una legge del tipo:

$$\bar{E} = \frac{\hbar v}{e^{\frac{\hbar v}{kT}} - 1} ; I(v) = \frac{v^2}{e^{\frac{\hbar v}{kT}} - 1} ; [\bar{E} \text{ è l'energia media.}]$$

Altra inadeguatezza classica è il modello atomico: classicamente, un atomo si può considerare come equilibrio tra forza elettrostatica e gravitazionale. Ma se così fosse, il modello atomico considerabile con quello planetario: orbite precise, dove l'elettrone segue. D'altra parte, un elettrone è carico elettricamente e, a causa dell'accelerazione, dovrebbe, per principio di conservazione dell'energia, crollare: una carica accelerata emette campo elettromagnetico, ma quindi perde energia. L'atomo non potrebbe essere instabile.

Quantisticamente, si elimina l'idea di orbite, ma si introduce quella di orbiti, ovvero zone dotate di densità di probabilità in cui si può trovare l'elettrone. Questo, se eccitato, può saltare in diversi livelli energetici quantizzati, ovvero discreti. Gli atomi eccitati emettono quantità discrete di radiazione, ben precise.

Potremo in seguito meglio di ciò.

Altra innovazione fu, come si può intuire, data dalla quantizzazione della luce: il fenomeno fu formulato da Einstein nel suo lavoro sull'effetto fotovoltaico: incidendo un metallo con un campo elettromagnetico, passa estrarvi degli elettroni.

In un metallo vi è un livello di energia limite, detto "livello di Fermi", rappresentante il livello limite raggiungibile nel

metallo. Al di sopra del livello di energia, vi è un livello proibito, in cui gli elettroni non possono stare. Ma quando si fornisce al metallo un'energia tale da far fare agli elettroni, un salto tale da "raggiungere il livello di Fermi e superare il livello proibito", allora posso estrarlo dal metallo.

Einstein osservò che, inoltre, la quantità di elettroni estraibili non dipende tanto dall'intensità del fascio di onda, quanto dalla frequenza:

$$E = \hbar v$$

Ciò rappresenta l'energia di un fotone, ovvia di un "quanto di luce": anche l'elettromagnetismo, dunque, presenta una natura di tipo discreto.

Fondamenti della Mecanica Quantistica

Un corretto cardine della meccanica quantistica è il dualismo onda-corpuscolo: un corpuscolo (o particella) è un'entità dotata di massa, e volume. Un'onda è un'entità dotata di una spazialità non definita. Un caso banale è l'onda piana:

$$f(x; t) = A \frac{\sin(\kappa x - \omega t)}{e^{ix} - e^{-ix}} ; \kappa = \frac{2\pi}{\lambda} ; \lambda = \text{lunghezza d'onda.}$$

$$\sin x = \frac{e^{ix} - e^{-ix}}{2i}$$

Una funzione d'onda $\Psi(x; t)$ piana si può dunque esprimere così:

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

Facciamo ora 3 esperimenti paralleli, e osserviamo un effetto molto particolare: immaginiamo di avere un muro dotato di due aperture

1) Se spianiamo proiettili verso questo muro, tenendo chiusa una fenditura per volta, notiamo che, con due fenditure, avremo una distribuzione "a campana" dei proiettili.

2) Se spianiamo un fascio di onde verso questo muro, avremo dei fenomeni di interferenza, talvolta distruttivi, talvolta costruttivi. La distribuzione sarà più irregolare, a "ondulazioni", a causa proprio di queste interferenze un po' distruttive, un po' costruttive.

3) Se spianiamo un fascio di elettroni contro il muro, essendo particelle, dovremo aspettare una distribuzione come la 1; opposto: avvergono delle interferenze. Dalle particelle, si comportano come onde.

Riformuliamo l'esperimento 3 in termini più matematici, introducendo alcuni elementi.

$p_i(x)$ = probabilità che un elettrone arrivi sul punto x dello schermo passando per la fenditura i .

$\Phi_i(x)$ = ampiezza di probabilità dell'evento in x .

$$p_i(x) \sim |\Phi_i(x)|^2.$$

Dato due fenditure, entrambe aperte, l'ampiezza di probabilità dei due eventi combinati è data dalla somma delle due funzioni; la probabilità agirà di conseguenza:

$$\Xi(x) = \Xi_1(x) + \Xi_2(x); \Rightarrow p_{1+2}(x) = |\Xi_1(x) + \Xi_2(x)|^2.$$

Esistono alcuni principi di base in meccanica quantistica; bisogna tener conto che essa è molto poco "intuitiva": già la sola dualità onda-particella sembra molto discutibile. È stato, in tal senso, formulato un principio fondamentale: il principio di corrispondenza.

Esso afferma che, passando dalla scala microscopica a quella macroscopica, dobbiamo trovare effetti ricordabili alla meccanica classica. La separazione tra questi due mondi, è detta "limite classico": esso va valutato in ogni singolo caso; ciò che si vicina dallo studio quantistico, va poi confrontato coi risultati sperimentali. Le quantità fisiche, risultano avere caratteristiche come multipli di quantità discrete. Nel caso della luce, ad esempio, l'energia è quantizzata:

$$E = \hbar \omega = \hbar 2\pi v; \vec{p} = \hbar \cdot \vec{k}, \kappa = \frac{\lambda \pi}{\lambda}; E = p \cdot c; \\ c = \frac{\omega}{\kappa} = \lambda \cdot v.$$

Secondo le ipotesi di De Broglie, si può sempre estendere il discorso, perfezionando il principio di dualità:

- A qualsiasi particella materiale è associato un campo di onde di lunghezza d'onda λ : particella \Rightarrow onda
- A qualunque campo ondulatorio corrisponde un quanto, ovvero una particella fondamentale: onda \Rightarrow particella.

L'ampiezza del campo d'onda è detta "funzione d'onda" $\Psi(\vec{z}; t)$.

In essa sono raccolte tutte le informazioni fisiche del sistema quantistico che si sta studiando.

ha probabilità di trovare il sistema in \vec{z} all'interno di un intervallo $d\vec{z}$, è:

$$|\Psi(\vec{z}; t)|^2 d\vec{z}.$$

Essendo una funzione di probabilità, sul volume totale Ω ,

$$\int_{\Omega} |\Psi(\vec{z}; t)|^2 d\vec{z} = 1$$

In generale Ψ è una funzione ai valori complessi. È appartenente allo spazio L^2 , nel suo dominio \mathbb{R}^3 . Date Ψ_1 e Ψ_2 , il sistema è esprimibile mediante combinazione lineare: $\Psi = a\Psi_1 + b\Psi_2$, $a, b \in \mathbb{C}$. Le funzioni Ψ appartengono ad uno spazio di Hilbert, ovvero ad uno spazio vettoriale di dimensione infinita. Per questo motivo, è possibile, in tale spazio, definire l'operazione di prodotto scalare, che sarà per noi fondamentale:

$$\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle = \int_{\Omega} \Psi_1 * \Psi_2 d\vec{z} \in \mathbb{C}$$

L'equazione di Schrödinger, ovvia l'equazione differenziale la cui soluzione è l'equazione d'onda, è

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{z}) \right] \Psi ; \quad \Delta = \vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla} = \text{Laplaciano}.$$

Facciamo un esempio pratico: sostituiamo a Ψ , $A e^{i(kx-\omega t)}$. Consideriamo come funzione d'onda una semplice onda piana.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{z}) \right] \Psi$$

Vogliamo studiare una particella libera, quindi $V(\vec{z})=0$.

$$\Psi(x; t) = A e^{i(kx-\omega t)} ; \quad i \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -i\omega \Psi ; \quad i \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = (ik)^2 \Psi ;$$

$$\hbar \omega \Psi = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Psi ; \quad \hbar k = p ; \quad \hbar \omega = E ;$$

$$E \cdot \Psi = \frac{p^2}{2m} \Psi .$$

Difiniamo dunque i primi operatori quantistici:

$$\hat{E} \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} ; \quad \hat{p} \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{x}} = -i\hbar \vec{\nabla} .$$

$$\hat{H} \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{z}) \quad (\text{Hamiltoniano: operatore dell'energia totale}).$$

Per le principali caratteristiche fisiche, risulta utile definire operatori, dalle proprietà particolari.

In quantistica risulta molto utile definire e studiare, anziché un valore deterministico, un valor probabilistico, con cui si sarà notato: sarà interessante, ai nostri fini, lo studio di un valor medio.

Dobbiamo essere in grado di associare, ad ogni grandezza fisica classica, G , un operatore quantistico, \hat{G} .

In fisica classica siamo interessati allo studio di una grandezza $G = G(\vec{z}, \vec{p}; t)$: deve darsi su posizioni, velocità, tempo.

All'inverso la sostituzione con operatori già noti, con $\vec{z} \mapsto \vec{z}$,

$$\vec{p} = -i\hbar \cdot \vec{\nabla}$$

$$\hat{G} = \hat{G}\left(\vec{z}, -i\hbar \vec{\nabla}, t\right).$$

Il valor medio associato ad una grandezza fisica, diventa:

$$\langle G \rangle = \langle \Psi | \hat{G} \cdot \Psi \rangle = \int_{\Omega} \Psi^*(\vec{z}; t) [\hat{G} \cdot \Psi(\vec{z}; t)] d\vec{z}$$

Il generico operatore \hat{G} è un operatore lineare che agisce sulle funzioni Ψ di stato del sistema quantistico.

L'introduzione del valor medio ci serve per trovare, dalle supponibili teorie della quantistica, un riscontro misurabile.

Possiamo pensare, data quantina Q , ad N misure, di $\langle \hat{Q} \rangle$, valor medio,

$$\langle \hat{Q} \rangle = \frac{\sum_{i=1}^N q_i}{N}.$$

Classicamente, l'incertezza nel valore di Q è

$$(\Delta Q)^2 = \langle (Q - \langle Q \rangle)^2 \rangle$$

Quantisticamente, possiamo sostituire a Q il suo operatore, \hat{Q} .

$$\langle \hat{Q} \rangle = \langle \Psi | \hat{Q} \cdot \Psi \rangle = \int_{\mathbb{R}} \Psi^*(\vec{r}; t) [\hat{Q} \cdot \Psi(\vec{r}; t)] d\vec{r}$$

La sua incertezza, ΔQ , sarà

$$(\Delta Q)^2 = \langle (\hat{Q} - \langle \hat{Q} \rangle)^2 \rangle = \int_{\mathbb{R}} \Psi^*(\vec{r}; t) [(\hat{Q} - \langle \hat{Q} \rangle)^2] \cdot \Psi(\vec{r}; t) d\vec{r}$$

Ecco, in quantistica, il cosiddetto "principio di indeterminazione di Heisenberg": non possiamo conoscere l'esatta posizione e velocità della particella. Verifichiamoci: immaginiamo di poter annullare l'incertezza

$$(\Delta Q)^2 = \langle (\hat{Q} - \langle \hat{Q} \rangle)^2 \rangle = 0 \Rightarrow \int_{\mathbb{R}} \Psi^*(\vec{r}; t) [(\hat{Q} - \langle \hat{Q} \rangle)^2] \cdot \Psi(\vec{r}; t) d\vec{r} = 0.$$

Sfruttando le proprietà del prodotto scalare di operatori antieggianti, quali Ψ_i , possiamo dire che

$$\int_{\mathbb{R}} [(\hat{Q} - \langle \hat{Q} \rangle) \cdot \Psi(\vec{r}; t)]^* [(\hat{Q} - \langle \hat{Q} \rangle) \cdot \Psi(\vec{r}; t)] d\vec{r} = 0.$$

Quindi ???

$$\int_{\mathbb{R}} \| [(\hat{Q} - \langle \hat{Q} \rangle) \cdot \Psi(\vec{r}; t)] \|^2 d\vec{r} = 0.$$

La funzione integrandi va dunque annullata:

GLI OPERATORI SU APPLICAZIONI LINEARI CONTINUO

$$(\hat{Q} - \langle \hat{Q} \rangle) \cdot \Psi = 0 ; \quad \hat{Q} \cdot \Psi - \langle \hat{Q} \rangle \Psi = 0$$

$$\hat{Q} \cdot \Psi = \langle \hat{Q} \rangle \cdot \Psi$$

Nota bene: \hat{Q} è un operatore lineare, $\langle \hat{Q} \rangle$ è uno scalare!

$\langle \hat{Q} \rangle = q$ è allora un'equazione agli autovalori!

Si può dimostrare che

- qualsiasi funzione $\Psi(\vec{r}; t) \in L^2(\mathbb{R})$ può essere scritta come somma in serie delle soluzioni autofunzionali $\Psi_i(\vec{r}; t)$.

$$\Psi(\vec{r}; t) = \sum_{i=1}^{\infty} a_i \Psi_i(\vec{r}; t), \quad a_i \in \mathbb{C}.$$

- le autofunzioni sono ortogonali in quanto si studia uno spazio ortogonale;

Possiamo dunque dire che

$$\langle \hat{Q} \rangle = \langle \Psi | \hat{Q} \cdot \Psi \rangle = \int_{\mathbb{R}} \Psi^*(\vec{r}; t) [\hat{Q} \cdot \Psi(\vec{r}; t)] d\vec{r} = \int_{\mathbb{R}} \sum_i a_i^* \Psi_i^*(\vec{r}; t) \hat{Q} \cdot \Psi_i(\vec{r}; t) d\vec{r} =$$

$$= \left[\sum_i a_i \Psi_i(\vec{r}; t) \right]^* d\vec{r} = \int_{\mathbb{R}} \left[\sum_i a_i^* \Psi_i^*(\vec{r}; t) \right] \cdot \left[\sum_j a_j \Psi_j(\vec{r}; t) \right] d\vec{r} =$$

$$= \int_{\mathbb{R}} \sum_{i,j} a_i^* a_j \Psi_i^* \Psi_j d\vec{r} = \sum_i |a_i|^2 q_i.$$

$|a_i|^2$ = prob dei valori misurati

q_i = valori misurati

Ogni volta che facciamo una misura, otteniamo un autovettore dell'operatore \hat{Q} .

Se facciamo molte misure, otteniamo valori distinti, con probabilità

$$|a_i|^2 = |\langle \Psi_i | \Psi \rangle|^2.$$

Ora vogliano chiedersi se è possibile che un sistema abbia indeterminazione nulla, misurando diverse grandezze fisiche contemporaneamente. Date due grandezze F e G , e i relativi operatori quantistici, le indeterminazioni devono al contempo valere 0:

$$\langle (\hat{F} - \langle \hat{F} \rangle)^2 \rangle > 0 \Rightarrow \hat{F} \cdot \Psi = \langle \hat{F} \rangle \cdot \Psi$$

$$\langle (\hat{G} - \langle \hat{G} \rangle)^2 \rangle > 0 \Rightarrow \hat{G} \cdot \Psi = \langle \hat{G} \rangle \cdot \Psi.$$

Ψ deve dunque al contempo essere autofumzioe degli operatori \hat{F} e \hat{G} , quindi $\hat{F} \circ \hat{G}$ devono avere lo stesso n autofumzioe. Ha scosì non fone, l'accuratezza di una misura influenzerebbe la misura dell'altra;

quindi, se:

1) $\hat{F} \cdot \Psi_n = f_n \Psi_n$; 2) $\hat{G} \cdot \Psi_n = g_n \Psi_n$. Ψ deve soddisfare l'eq. di Schrödinger.
Se applichiamo alle due equazioni gli operatori dell'altra, vediamo che

$$1) \hat{G} \cdot (\hat{F} \cdot \Psi_n) = \hat{G} \cdot (f_n \Psi_n) = f_n g_n \Psi_n$$

$$2) \hat{F} \cdot (\hat{G} \cdot \Psi_n) = \hat{F} \cdot (g_n \Psi_n) = g_n f_n \Psi_n$$

Dunque,

$$\hat{F} \cdot (\hat{G} \cdot \Psi_n) - \hat{G} \cdot (\hat{F} \cdot \Psi_n) = 0; (\hat{F} \cdot \hat{G} - \hat{G} \cdot \hat{F}) \Psi_n = 0; \hat{F} \cdot \hat{G} - \hat{G} \cdot \hat{F} = 0.$$

L'operatore definito da questa relazione, ci indica:

$$\hat{F} \cdot \hat{G} - \hat{G} \cdot \hat{F} = [\hat{F}, \hat{G}]$$

È detto "commutatore".

Se $[\hat{F}, \hat{G}] \neq 0$ le autofumzioe non sono comuni a \hat{F} e \hat{G} .

Due grandezze fisiche si possono misurare con precisione finita se e solo se il loro commutatore è nullo.

In meccanica quantistica, per definire lo stato di un sistema, è necessaria una funzione d'onda, $\Psi(\vec{r}; t)$, ma anche un "set" di grandezze fisiche corrispondenti a operatori mutuamente

✓ ??

commutanti, corrispondenti agli autonori dell'insieme completo di grandezze fisiche scelte per descrivere il sistema.

Operatori quantistici:

$$\bullet \text{Operatore posizione: } \hat{r} \Rightarrow \frac{\hat{x}}{i} = \vec{r}$$

$$\bullet \text{Operatore impulso: } \hat{p} \Rightarrow \frac{\hat{p}}{i\hbar} = -i\hbar \vec{v}$$

$$\bullet \text{Operatore vettore d'onda: } \hat{R} \Rightarrow \frac{\hat{p}}{\hbar} = \frac{\hat{x}}{i} = -i\vec{v}$$

$$\bullet \text{Operatore energia cinetica: } \hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m} \Rightarrow \hat{T} = \frac{1}{2m} \frac{\hat{p}^2}{\hbar^2} = \frac{1}{2m} \Delta = \frac{-\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2$$

L'operatore dell'energia totale, l'Hamiltoniano, e il momento angolare saranno molto utili per i nostri modelli: qua l'Hamiltoniano \hat{H}

$$H = T + V = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{r}); \Rightarrow H = \hat{T} + V = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}).$$

E l'operatore momento angolare:

$$\hat{L} = \vec{r} \times \vec{p} \Rightarrow \hat{L} = \frac{1}{i} \vec{r} \times \vec{p} = \vec{r} \times (-i\hbar \vec{v}), \quad \text{Possiamo pensare come vettore}$$

$$\hat{L}_x = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right); \hat{L}_y = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial x} \right); \hat{L}_z = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$$

Viene anche introdotto, per moti che dicono in seguito, l'operatore modulo quadro del momento angolare:

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$$

Consideriamo, in polari sferiche, alcuni operatori:

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$$

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right]$$

$$\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = \frac{1}{2m} \left[-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta \cos^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right]$$

Risulta interessante \hat{L}_z , al punto da studiarlo in polari, poiché, parlando di momenti angolari, spesso si parla di studi sulle conservazioni in certe condizioni: in effetti, considerando \hat{L}_z l'axe di rotazione, possiamo dire che si conserva, su L_z , il momento angolare.

\hat{L}^2 è importante perché scopriremo presto che ha una proprietà interessante quantisticamente.

Essimeremo ora, con gli operatori studiati, alcuni esempi di problemi agli autonaloni.

Iniziamo col risolvere l'equazione di Schrödinger con l'operatore impulso, cioè a trovare l'equazione d'onda $\Psi(x)$:

$$\hat{P}\Psi(\vec{r}) = \vec{P}\Psi(\vec{r}) ; \quad \hat{P} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

$$\hat{p}_x\Psi(x) > p_x\Psi(x) \Rightarrow -i\hbar \frac{\delta\Psi}{\delta x} = p_x\Psi(x) ; \Rightarrow \int \frac{d\Psi}{\Psi} = i\frac{p_x}{\hbar} \int dx ;$$

$$\log\Psi = i\frac{p_x}{\hbar}x + c ; \quad \Psi(x) = A e^{i\frac{p_x}{\hbar}x}$$

Normalizziamo ora la funzione d'onda trovata:

$$\langle \Psi_p | \Psi_p \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} |A|^2 e^{i\frac{p_x}{\hbar}x} dx = |A|^2 2\pi \hbar \delta(p - p') ; \quad \delta \text{ è la delta di Dirac}$$

$$\Psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-i\frac{p_x}{\hbar}x}$$

Lavoriamo ora su \hat{L}_z :

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} ;$$

$$\hat{L}_z \cdot \Psi = \hat{l}_z \cdot \Psi ; \quad -i\hbar \frac{\delta\Psi}{\delta\varphi} = \hat{l}_z \cdot \Psi ; \quad \int \frac{d\Psi}{\Psi} = i\frac{\hat{l}_z}{\hbar} \int d\varphi ;$$

$$\log\Psi = i\frac{\hat{l}_z}{\hbar}\varphi + c ; \quad \Psi = A e^{i\frac{\hat{l}_z}{\hbar}\varphi}$$

Prima di normalizzare la funzione del momento che lavoriamo

con una funzione periodica, deve varia con l'angolo φ , dobbiamo imponere la periodicità alla funzione d'onda.

$$\Psi(\varphi) = \Psi(\varphi + 2\pi) :$$

$$A e^{i\frac{\hat{l}_z}{\hbar}\varphi} = A e^{i\frac{\hat{l}_z}{\hbar}(2\pi + \varphi)} = A e^{i\frac{\hat{l}_z}{\hbar}\varphi} \cdot A e^{i\frac{\hat{l}_z}{\hbar}2\pi}$$

$$\text{Quindi, } i\frac{\hat{l}_z}{\hbar}2\pi = m \cdot 2\pi ; \quad i \cdot \hat{l}_z = m \cdot \hbar ; \quad m = 0, \pm 1, \pm 2 \dots$$

Come ogni volta che abbiamo poste restrizioni, ottengo ottenendo un risultato interessante: la quantizzazione degli stati, in livelli discreti, tali per cui per l'angolo $\hat{l}_z = m \cdot \hbar$.

Il momento angolare rispetto a \hat{z} è dunque quantizzato!

Normalizziamo ora la funzione d'onda Ψ :

$$\langle \Psi_m | \Psi_m \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_m^* \Psi_m d\varphi = \int_{-\infty}^{+\infty} |A|^2 d\varphi = 1$$

$$A = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} ; \quad \Psi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}$$

Percché \hat{L}^2 è importante: vediamo ora di studiare il commutatore di alcune grandezze fondamentali:

$$[x_i ; z_j] = 0$$

$$[p_i ; p_j] = 0$$

$$[x_i ; p_j] = i\hbar \delta_{ij}$$

$$[L_x ; L_y] = i\hbar L_z$$

$$[L^2 ; L_i] = 0 : \text{ il modulo quadrato del momento angolare, e } L = \sqrt{x^2 + p^2} \text{ è una componente parallela ad un asse, comunita!}$$

Soluzione di equazione di Schrödinger stazionaria in alcuni casi particolari

Ci preoccupiamo ora di studiare particelle quantistiche in situazioni man mano sempre più complesse;

- Particella quantistica libera: per particella quantistica libera si intende una particella di massa m soggetta a potenziale nullo: $V(\vec{r})=0$, ; $H=\frac{\vec{p}^2}{2m}$

Parlendo di problema monodimensionale, l'equazione di Schrödinger sarà:

$$H\psi = E\psi \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi = E\psi ; \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E\psi = 0.$$

Risolvendo, vedremo che l'equazione avrà forma:

$$\psi(x) = A e^{i k x}, \quad k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E}. \quad ; \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}.$$

Invece di direto alla relazione, abbiamo il principio di De Broglie che lega l'impulso della particella alla sua lunghezza d'onda.

$\psi_n(x)$ è dunque funzione sull' spazio, e del numero quantico n .

Sostituendo a x il vettore posizionale $\vec{r} = (x; y; z)$,

$$\psi_n(\vec{r}) = A e^{i \vec{k} \cdot \vec{r}} ; \quad \vec{k} = (k_x; k_y; k_z) ; \quad E = \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k}^2)^2$$

- Particella quantistica in buca di potenziale: Consideriamo questa volta la particella in meno a due picchi di potenziale infiniti. Ciò non può funzionare, monodimensionalmente, esprimendo una funzione del potenziale:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x \in [0; a] \\ \infty & x = \{0; a\} \end{cases}$$

Nei punti 0 e a abbiamo i due picchi infiniti di potenziale V .

Questa volta l'Hamiltoniana della funzione varrà:

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(x).$$

La soluzione generale dell'equazione di Schrödinger sarà:

portando da

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = E\psi(x), \Rightarrow \psi(x) = A e^{idx} + B e^{-idx}. \quad ; \quad d = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E}$$

La soluzione dell'equazione di Schrödinger, ora la funzione d'onda, si può pensare come somma di due contributi; abbiamo a questo punto due incognite: A e B ; per questo mettiamo inscriviamo nel problema delle condizioni al contorno: supponiamo infatti che sui bordi, 0 e a , abbiamo potenziale infinito, dunque la probabilità che la particella si trovi in tali punti è nulla. Da ciò:

$$\psi(0) = \psi(a) = 0 ; \quad \begin{cases} A + B = 0, & x=0 \\ A[e^{ida} - e^{-ida}], & x=a \end{cases} \Rightarrow \psi(a) = 2A i \sin da$$

Da ciò, poniamo dire che $d \cdot a = n \cdot \pi$

$$\psi_n(x) = 2A i \sin(nx)$$

Normalizzando mediante prodotto scalare,

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1 = 4A^2 \int_0^a \sin^2(nx) dx ; \quad A = \sqrt{\frac{1}{2a}}$$

$\psi_n(x)$ dipende da n e da x ; l'energia dunque non varia con continuità ma in stati discetti, identificati dai vari n .

Attribuiamo una certa energia alla particella, essa comunque assumrà un livello disceto, non "esattamente corrispondente" a quello dell'energia perché non esiste!

Si può estendere la soluzione al problema tridimensionale:

$$\psi_n(\vec{r}) = 2A i \sin(dx) \sin(dy) \sin(dz) ; \quad \vec{n} = (n_x; n_y; n_z) ; \quad E_n = \frac{\hbar^2 \vec{n}^2}{2ma^2} \vec{n}.$$

In tre dimensioni, i numeri quantici sono quelli del vettore \vec{n} : n_x, n_y, n_z . Diverse forme possono dunque portarsi allo stesso livello energetico. In parole povere, i livelli energetici sono degeneri.

Pensando geometricamente, prima la bolla era in un segmento; ora possiamo pensare come una sfera di potenziale infinito, e regolare \vec{r} . La funzione d'onda $\Psi(\vec{r})$ sarà "confinata dalla sfera di potenziale".

In questa sarebbe pensare le orbite

$$2\pi r = n\lambda ; \quad r = n \frac{\lambda}{2\pi}.$$

• Particella soggetta a un gradino di potenziale: supponiamo di avere una particella che, muovendosi nell'asse x , incontra un gradino, in 0 , di potenziale, più alto di V_0 .

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x \leq 0 \\ V_0 & x > 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} H = \frac{p^2}{2m} & x \leq 0 \\ H = \frac{p^2}{2m} + V_0 & x > 0 \end{cases}$$

A questo punto, l'equazione di Schrödinger, sarà:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi = 0 \quad x \leq 0$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) \psi = 0 \quad x > 0$$

Le soluzioni per le due regioni saranno:

$$\psi_1(x) = A e^{idx} + B e^{-idx}, \quad \lambda = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E} \quad x \leq 0$$

$$\psi_2(x) = C e^{ipx} + D e^{-ipx}, \quad p = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}}, \quad x > 0$$

A questo punto, abbiamo due possibilità:

$$\begin{cases} V_0 > E \\ V_0 = E \\ V_0 < E \end{cases}$$

Se $V_0 > E$, la particella "salta il gradino", e prosegue tranquillamente, con $E_2 = E - V_0$.

Un caso molto più interessante, è per $V_0 > E$: classicamente, la particella, arrivata al gradino, si fermerebbe, e non proseguirebbe. Andiamo quindi a studiare le funzioni: definiamo γ tale per cui

$$\gamma = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)} ; \quad \text{da cui } \psi_2(x) = C e^{ix/\gamma} + D e^{-ix/\gamma}.$$

Troviamo ora le variabili A, B, C, D , cercando di applicare le condizioni "ideali":

1) le funzioni d'onda devono essere continue e derivabili in tutto il dominio; in $x=0$ ψ deve essere continua e derivabile.

2) le funzioni d'onda vanno normalizzate.

Come soluzioni (non normalizzate) avremo:

$$\psi_1(x) = A e^{idx} + B e^{-idx}, \quad x \leq 0$$

$$\psi_2(x) = C e^{-\gamma x}, \quad x > 0, \quad \gamma = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$$

La funzione d'onda prevede dunque una possibilità (remota, come e^{-x}), che una particella entri in una zona di spazio in cui il potenziale è maggiore della sua energia totale, ossia sul suo hamiltoniano.

Questo effetto quantistico è detto "effetto tunnel". Ciò vale se V_0 è finito: altrimenti, come prima, $\psi(x) = 0$.

Allora così introdotto l'effetto Tunnel. Estendiamo allora il nostro modello:

• Buca di potenziale a pareti finite: immaginiamo di avere la nostra particella quantistica all'interno di una buca di potenziale, ma a "pareti finite"; quindi, per effetto tunnel, la particella può uscire, anche se la sua hamiltoniana è inferiore all'energia potenziale delle pareti.

• Barriera di potenziale rettangolare: consideriamo una "barreca" di potenziale rettangolare, da 0 a l , di potenziale V_0 :

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 ; x > l \\ V_0 & 0 < x < l \end{cases}$$

E scriviamo dunque le due equazioni di Schrödinger, per le due zone, come già fatto prima per il gredino:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi = 0 \quad x < 0 ; x > l$$

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

Analizziamo il $x < l$: $\gamma = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)}$; $E < V_0 \Rightarrow \gamma \gg$

$$\Psi_2(x) = G e^{\gamma x} + F e^{-\gamma x}$$

Per effetto tunnel, la particella, pur con $E < V_0$, può superare la barriera con la solita probabilità di $e^{-\gamma x}$.

Si interpreta ora quantisticamente un modello classico fondamentale per interpretare fenomeni di tipo ondulatorio: l'oscillatore armonico.

Immaginiamo di avere un potenziale di tipo elastico:

$$V(x) = \frac{1}{2} Kx^2$$

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} Kx^2$$

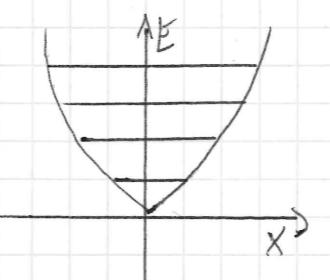
L'operatore hamiltoniano H vale:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} Kx^2$$

Questa equazione ha soluzioni

$$\Psi(\ell) = H/\ell e^{-\frac{\ell}{2}}; \ell = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x; \ell \text{ IDENTIFICA UN CERRO LIVELLO ENERGETICO.}$$

In caso fondamentale, è che se prima, classicamente, l'oscillatore armonico era rappresentabile con una parabola, ora è identificabile così:



la parabola rappresenta il grafico dell'energia in un oscillatore classico.

Le righe sono l'oscillatore quantistico: l'energia nell'oscillatore quantistico è quantizzata.

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega, n=0, 1, 2, \dots$$

Ogni stato quantistico di un oscillatore è determinato dall'onda $\Psi_n(x)$ e dal numero quantico n ; questo mostra il carattere discreto dell'oscillatore.

L'oscillatore cambia di stato assorbendo o emettendo quanti di energia pari a $\hbar \omega$.

Rotore rigido

Consideriamo ora quantisticamente un sistema in rotazione: la sua energia d'oscillamento è

$$E = \frac{\hbar^2}{2} \frac{L^2}{I_z};$$

L'operatore hamiltoniano del sistema sarà:

$$H = \frac{\hbar^2}{2} \frac{L^2}{I_z}$$

L'equazione agli autovettori sarà:

$$H \Psi - \frac{\hbar^2}{2} \frac{L^2}{I_z} \Psi = E \Psi$$

L'equazione dell'energia dipenderà da un numero quantico, l .

$$E = \frac{\hbar^2}{2I} l(l+1); \quad l=0, 1, 2, \dots$$

Dalla quantizzazione del rotore rigido, possiamo intuire che, in quantistica, anche il momento angolare risulta essere quantizzato.

Ricordiamo che

$$L^2 = \hbar^2 l(l+1), \quad l=0, 1, 2, 3$$

In realtà, dunque, anche l'orientazione del momento angolare nello spazio risulta avere solo valori discreti; infatti,

$$M_z = \hbar m_z, \quad m_z = -l, -l+1, \dots, l \quad (\text{varia nei numeri interi da } -l \text{ ad } l).$$

Questo modello descrive le molecole: definito l , autovettore dell'energia, lo stato quantico è uno dei $2l+1$ stati possibili.

Mediatamente i modelli che abbiamo descritto e man mano reso sempre più completi, possiamo ora applicare le nostre conoscenze per descrivere un caso reale: vogliamo creare un modello quantistico che descriva, mediante l'equazione di Schrödinger, un atomo di idrogeno. Studieremo un elettrone in un atomo di idrogeno.

Il potenziale $V(\vec{r})$ dell'hamiltoniana sarà il potenziale dato dalla legge di Coulomb: conica e, moltiplicata per Z protoni.

$$V(r) = \frac{-ze}{r}$$

L'hamiltoniana del sistema nucleo-elettrone sarà:

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(\vec{r}) \Rightarrow \mu = \frac{mN}{m+N} \approx m.$$

Risolviamo il relativo problema agli autovettori:

$$\begin{aligned} H \cdot \Psi(\vec{r}) &= E \cdot \Psi(\vec{r}); \\ \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{ze^2}{r^2} \right] \Psi(\vec{r}) &= E \Psi(\vec{r}) \end{aligned}$$

Possiamo uscire con il tutto in coordinate polari sferiche:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{P^2}{2m r^2} - \frac{ze^2}{r^2} \right] \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r}).$$

L'equazione ha una soluzione interessante: scomponendo la soluz., si ne può trovare una particolarità:

$$\Psi(\vec{r}) = \Psi(r; \theta, \phi) = E(r) Y(\theta, \phi)$$

È cioè scomponibile come funzione del raggio e funzione degli angoli. Le funzioni d'onda dipendono da tre numeri quantici interi, n, l, m .

$$\Psi(r; \theta, \phi) = \Psi_{n,l,m} = E_{n,l,m}(r) \cdot Y_l^m(\theta, \phi).$$

ψ_{nlm} sono funzioni sferiche: si tratta di soluzioni dell'equazione di Laplace, ortogonali, in coordinate sferiche.

In, l sono funzioni legate ai polinomi di Legendre; quindi i polinomi ortogonali.

Le funzioni d'onda dell'elettrone, e dunque il suo stato sono caratterizzate dai tre numeri quantici: n, l, m.

- n: rappresenta l'energia dello stato in cui ci si trova; rappresenta, per così dire, il livello energetico.
- l: rappresenta il quadro del momento angolare
- m: rappresenta una delle componenti del momento angolare.

Guardiamo più nel dettaglio:

• n, o "numero quantico principale", è legato all'energia dello stato dalla relazione

$$E_n = -\frac{m^2 e^4}{2 \hbar^2} \frac{1}{n^2}, n=1, 2, 3, \dots$$

• l, o "numero quantico azimuthale", è legato al quadro quadro del momento angolare L. l varia da 0 a n-1.

• m è detto "numero quantico magnetico", ed è legato a L, ma alla componente proiettata sull'asse cartesiano z del momento angolare. m varia da -l a l: m = -l, ..., 0, ..., l

Questi tre numeri quantici sono associati agli operatori di operatori tra loro commutanti.

$$\hat{H} \Psi_{nlm}(\vec{r}) = E_n \Psi_{nlm}$$

$$\hat{L}_z \Psi_{nlm}(\vec{r}) = l(l+1) \hbar^2 \Psi_{nlm}$$

$$\hat{l}^2 \Psi_{nlm}(\vec{r}) = m^2 \hbar^2 \Psi_{nlm}$$

Per un certo valore di energia E_n , associata al numero n, corrispondono più stati (discreti) con quadro del momento angolare e tesa curamente diversi.

L'equazione di Schrödinger stazionaria può essere solo risolta in modo esatto nel caso dell'atomo di idrogeno; si parla di densità elettronica: abbiamo degli orbitali, ossia delle probabilità sui numeri quantici n, l, m, che rappresentano zone in cui vi è una minore o maggiore probabilità di trovare l'elettrone.

Eperimento di Stern e Gerlach

Si deve fischi emisso un fascio di elettroni, e lo inviano attraverso le espansioni polari di un magnete, generante un campo magnetico \vec{B} non uniforme lungo l'asse z; se le particelle caricate fossero state classiche, avrebbero perduto moto rettilineo ad un loro qualsiasi arco; l'esperimento ha invece evidenziato la presenza di un momento magnetico intrinseco alle particelle,

$\vec{\mu}_1$ tale per cui $\vec{F} = F_z = \mu_1 \frac{dB}{dz}$; invece di disperdersi in modo casuale, le particelle si muovono in solo 2 punti, nell'arco 2p.

I momenti magnetici possono avere una componente z con due valori: $+\mu_1, -\mu_1$.

Il momento magnetico delle particelle, e dunque il momento angolare, risultava essere quantizzato.

Il momento angolare intrinseco venne assegnato a $\vec{S} = \vec{\sigma}$.

$$\vec{S}^2 \Rightarrow \text{autovettori } s(s+1) \hbar^2$$

$$\vec{S}_z \Rightarrow \text{autovettori } m_s = -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}.$$

Le particelle che studiamo hanno $s = \pm \frac{1}{2}$. \Rightarrow Numeri quantici di spin.

Le particelle a spin semi-intero sono dette "fermioni" quelle a spin intero "bosoni".

In più dimostriamo una relazione interessante tra momento angolare orbitale e momento magnetico:

$$\frac{\vec{L}}{S} \iff \frac{\vec{\mu}_L}{\mu_S}$$

Per un elettrone, i momenti orbitali sono della forma:

$$\vec{\mu}_L = -\frac{e}{2m} \vec{L} = -\mu_B \frac{\vec{L}}{h} \quad ; \quad \mu_B = \frac{e\hbar}{2m}$$

I momenti intrinseci \vec{s} hanno forma:

$$\vec{\mu}_S = -2 \frac{e}{2m} \vec{L} = -2 \mu_B \frac{\vec{S}}{h}$$

Oltre ai numeri quantici n, l, m_l , ne abbiamo ancora uno: il numero quantico di spin; poniamo infatti immaginare un elettrone come una sorta di "tavola". Chiameremo questo quanto numero, m_s .

Il fisico tedesco Pauli intuì così: le particelle a spin intero (bosoni), e quelle a spin semi-intero (fermioni), hanno una profonda differenza: i fermioni devono occupare stati diversi, ma che differiscono almeno di uno dei quattro numeri quantici; i bosoni non hanno questo problema, e quindi più bosoni possono occupare lo stesso stato quantico.

ULTIMI 15 SOTTO SLIDE DEL 7-

Approssimazione di Born e Oppenheimer

Complicando il nostro problema e il nostro modello, studiamo un sistema di N atomi, con un totale di n elettroni.

Anticipiamo che le grandezze indicate con lettere maiuscole indichino il nucleo, quelle con lettere minuscole gli elettroni.

\vec{R}_i sarà la posizione dell' i -esimo atomo, M_i la sua massa, Z_i la sua carica. \vec{r}_i indicherà l' i -esimo elettrone di massa m .

L'Hamiltoniana del sistema sarà data da:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & -\sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2}{2M_i} \nabla_{\vec{R}_i}^2 + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \frac{Z_i Z_j e^2}{|\vec{R}_i - \vec{R}_j|} - \sum_{i=1}^n \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\vec{r}_i}^2 + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \\ & - \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^n \frac{Z_i e^2}{|\vec{R}_i - \vec{r}_j|} \end{aligned}$$

1) Energia cinetica dei nuclei $\hat{T}_{\vec{R}}$

2) Energia elettostatica dei nuclei $V(\vec{R})$

3) Energia cinetica degli elettroni $\hat{T}_{\vec{r}}$

4) Energia elettostatica repulsiva degli elettroni $V(\vec{r})$

5) Energia elettostatica attrattiva elettroni-nucleo $V(\vec{r}; \vec{R})$

$$\hat{H} = \hat{T}_{\vec{R}} + V(\vec{R}) + \hat{T}_{\vec{r}} + V(\vec{r}) + V(\vec{r}; \vec{R}).$$

Risolvere un'equazione di Schrödinger con tale hamiltoniana non è un problema da poco; si sceglie di cercare una soluzione in cui l'equazione di Schrödinger permetta di determinare una funzione d'onda con contributi dal nucleo e dagli elettroni separabili:

si cerca di trovare un'approssimazione tale per cui una variazione del nucleo non perturbi il sistema degli elettroni: questa è l'approssimazione di Born-Oppenheimer.

$$\Psi(\vec{R}; \vec{r}) = \Psi_{\vec{R}}(\vec{r}) \cdot \Xi(\vec{R})$$

N.B.: Ψ avrà comunque bisogno di \vec{R} , per avere la dipendenza parametrica degli elettroni rispetto a quella del nucleo.

Dunque vogliamo risolvere l'equazione

$$\hat{H} \cdot \Psi_{\vec{R}}(\vec{r}) \cdot \Xi(\vec{R}) = E \Psi_{\vec{R}}(\vec{r}) \Xi(\vec{R})$$

$$[\hat{T}_{\vec{R}} + V(\vec{R}) + \hat{T}_{\vec{r}} + V(\vec{r}) + V(\vec{r}; \vec{R})] \Psi_{\vec{R}}(\vec{r}) \Xi(\vec{R}) = E \Psi_{\vec{R}}(\vec{r}) \Xi(\vec{R}).$$

$$\Rightarrow \hat{T}_{\vec{R}} [\Psi_{\vec{R}}(\vec{r}) \Xi(\vec{R})] + V(\vec{R}) \Psi_{\vec{R}}(\vec{r}) \Xi(\vec{R}) + \Xi(\vec{R}) \cdot \hat{T}_{\vec{r}} [\Psi_{\vec{R}}(\vec{r})] + V(\vec{r}) \Psi_{\vec{R}}(\vec{r}) \Xi(\vec{R}) +$$

$$+ V(\vec{r}; \vec{R}) \Psi_{\vec{R}}(\vec{r}) \Xi(\vec{R});$$

$$\Rightarrow \hat{T}_{\vec{R}} [\Psi_{\vec{R}}(\vec{r}) \Xi(\vec{R})] + \Xi(\vec{R}) [\hat{T}_{\vec{r}} + V(\vec{r}; \vec{R}) + V(\vec{r})] \Psi_{\vec{R}}(\vec{r}) + V(\vec{r}) \Psi_{\vec{R}}(\vec{r}) \Xi(\vec{R}) =$$

$$E_{\text{tot}} \Psi_{\vec{R}}(\vec{r}) \Xi(\vec{R}).$$

$$\hat{T}_{\vec{R}} [\Psi_{\vec{R}}(\vec{r}) \Xi(\vec{R})] = -\sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2}{2M_i} \vec{\nabla}_i^2 [\Psi_{\vec{R}}(\vec{r}) \Xi(\vec{R})] = \\ = -\sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2}{2M_i} \left[\frac{\partial^2}{\partial R_i^2} \Psi_{\vec{R}}(\vec{r}) \Xi(\vec{R}) + 2 \frac{\partial}{\partial R_i} \Psi_{\vec{R}}(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial R_i} \Xi(\vec{R}) \right]$$

L'approssimazione di Born-Oppenheimer stabilisce che il termine appena espresso, è trascurabile.

L'equazione si riduce a

$$[\hat{T}_{\vec{r}} \Xi(\vec{R})] + [V(\vec{R}) \Xi(\vec{R})] = (E_{\text{tot}} - E_{\vec{R}}) \Xi(\vec{R}) \quad (1)$$

$$[\hat{T}_{\vec{r}} + V(\vec{r}; \vec{R}) + V(\vec{r})] \Psi_{\vec{R}}(\vec{r}) = E_{\vec{R}} \Psi_{\vec{R}}(\vec{r}) \quad (2)$$

1) Studia la configurazione dei nuclei per uno stato elettronico definito

2) Studia la configurazione elettronica a nuclei in posizione \vec{R} .

Le due configurazioni sengono dandole interagire debolmente.

Se però la separazione tra gli stati elettronici è dell'ordine dell'energia associata alle vibrazioni dei nuclei, l'approssimazione non è applicabile.

L'approssimazione si può applicare a due condizioni:

1) Temperatura costante

2) Effetto di moto di vegetazione termica molto basso.

L'approssimazione di Born-Oppenheimer è molto utile e applicata ad un contesto semiclassico: si tratta di situazioni in cui, pur essendo in finica classica si introducano effetti quantistici.

Consideriamo ad esempio un elettrone come una "densità di carica":

$$\rho = \frac{e}{\frac{4}{3} \pi r_a^3}$$

In presenza di un corpo C , avviene un fenomeno di separazione, spostamento della nube elettronica:

$$F_{el} = \frac{\frac{4}{3} \pi (\Delta_2)^3 \rho \cdot e}{4 \pi \epsilon_0 \Delta_2^2} = \frac{e^2 \Delta_2}{l^2} = \frac{e^2}{4 \pi \epsilon_0} \frac{\Delta_2}{r_a^3} = k_0 \cdot \frac{e^2}{r_a^3}$$

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m_e}} = 2,2 \cdot 10^{16} \text{ Hz}; \nu = 33 \cdot 10^{13} \text{ Hz}$$

Consideriamo questo sistema come un sistema elastico armonico.

$$E_p = \frac{1}{2} K \delta_x^2$$

$$\Delta E = \hbar \omega \approx 13,7 \text{ eV}$$

Ci sono tre casi interessanti da considerare, sullo studio di particelle vincolate: vediamo le energie in 3 casi:

- Energia in buca di potenziale:

$$E_m = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2 \quad | \quad n = \text{numero quantico principale}$$

ar longhezza buca

- Rotore rigido quantistico:

$$E_r = \frac{\hbar^2}{2I_z} l(l+1) \quad I_z = \text{momento di inerzia}$$

$l = \text{numero quantistico (quontto) azimutale}$

- Oscillatore armonico quantistico:

$$E_m = \hbar \omega \left(m + \frac{l}{2} \right) \quad \omega = \text{frequenza di risonanza}$$

$m = \text{numero quantico magnetico}$

Se volessimo studiare una molecola di idrogeno H_2 , l'energia avrebbe tutti e tre i contributi:

$$E = E_p + E_r + E_m$$

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2M L^2} m^2 + \frac{\hbar^2}{2I_z} l(l+1) + \hbar \omega \left(m + \frac{l}{2} \right) \quad I_z = \frac{L}{4} M d^2$$

Consideriamo $E = k_B T$.

$$E_m = 4,1 \cdot 10^{-19} \text{ eV}$$

→ contributi delle 3 energie sono: $E_r = 8,8 \cdot 10^{-3} \text{ eV}$

$$E_p = 0,25 \text{ eV}$$

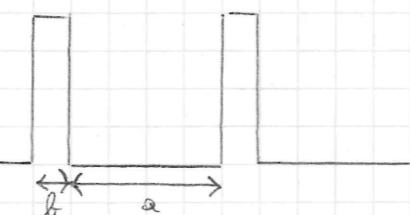
A temperatura ambiente, E_m (tra i livelli traslatoriali), ed E_r (tra i livelli rotazionali, circa a 82 K) sono possibili.

Ha risonanza, cioè i livelli vibranti, possono essere per temperatura circa uguali a 2850 K.

Bandi di energia degli elettroni

Vogliamo studiare il comportamento degli elettroni all'interno di un cristallo.

Sappiamo già da certe esperimentali che la materia non è compatta, ma si può rappresentare invece come una sequenza di buche di potenziale. Studiamo il caso unidimensionale: fatto un elettrone in un cristallo, formato da atomi disposti in modo periodico, si può semplificare il modello esistente per privilegiare uno con vere e proprie "panetti di potenziale" in presenza dei nuclei. Consideriamo di avere buche di potenziale di larghezza a e distanza b :



Questa serie di buche è periodica.

Potremmo studiare cosa come il calcolo del Hamiltoniano del sistema, e cercare le soluzioni dell'equazione di Schrödinger.

Bloch ha però dimostrato che una soluzione possibile è:

$$\Psi(x) = u(x) e^{ikx}, \quad u(x) \text{ funzione periodica di } (a+b)$$

$$\Psi(x) = \Psi(x+(a+b)) \Rightarrow u(x+(a+b)) = u(x)$$

Vediamo un po' meglio che cosa capita:

$$\hat{H}_L = \frac{\hat{P}^2}{2m} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}; \quad \hat{H}_2 = \frac{\hat{P}^2}{2m} + V_0 = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_0$$

Le eq. di Schrödinger saranno:

$$1) \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) \psi = 0$$

$$2) \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) \psi = 0$$

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

Sostituendo la soluzione $\psi(x) = u(x) e^{i\kappa x}$ nelle equazioni, otteniamo

$$1) \frac{d^2u}{dx^2} + 2ik \frac{du}{dx} - (k^2 - \lambda^2) u = 0 \quad 2) \frac{d^2u}{dx^2} + 2ik \frac{du}{dx} - (k^2 + g^2) u = 0.$$

$$u_{1,k}(x) = (A e^{ikx} + B e^{-ikx}) e^{-i\kappa x}$$

$$u_{2,k}(x) = (C e^{ix} + D e^{-ix}) e^{-i\kappa x}$$

Applicando le condizioni al contorno di continuità in 0 e a, fornire d'onda (perpendicolarmente), la $u(x)$ e le derivate devono essere continue.

Si ottiene che

$$|G_s(k/a)| = 1$$

Avere un'energia quantificata in funzione di k :

$$E = E(k).$$

Approssimiamo $g^2 \approx \sqrt{E}$;

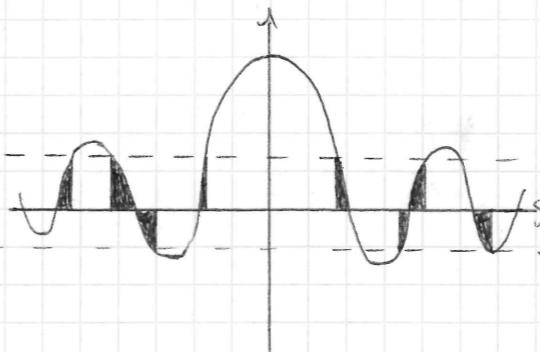
Se $b \rightarrow \infty$, $\cosh(gb) \rightarrow 1$, $\sin(gb) \rightarrow gb$.

$$a \gg b, \Rightarrow \lambda^2 \ll g^2 \Rightarrow P = \frac{m \cdot a}{\hbar^2} V_0 b$$

Cioè da vediamo è che non abbiamo livelli discreti di energia, ma "bande di energia".

$$-L \leq P \frac{\sin(\frac{da}{\lambda})}{da} + G_s(\frac{da}{\lambda}) \leq L$$

Ameno una funzione da ricorda l'oscillatore armonico smorzato:



In vero sono rappresentate le bande di energia del solido.
(dell'asse 1D).

L'ampiezza di questo dipende da P

Per P grande, le zone di salita e discesa della curva diventano strette, e quindi anche le bande tendono a diventare sempre più vicine a livelli discreti; per P piccolo, la particella tende ad avere libera-

Si dimostra che esistono livelli permessi, sotto forma di bandi, e proibiti, sotto forma di gap di energia.

Apprendiamo meglio cosa dobbiamo detto finora: abbiamo la nostra funzione

$$P \frac{\sin(\frac{da}{\lambda})}{da} + G_s(\frac{da}{\lambda}) = G_s(\frac{ka}{\lambda}) \quad k \cdot a = 2n\pi \Rightarrow k = \frac{2\pi}{a} \cdot n$$

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

k è multiplo di $\frac{2\pi}{a}$, e quindi di fatto non sono mille stessa livello di energia.

Vediamo un esempio

Dallo stesso libro nel reticolo monodimensionale, avremo, come energia:

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \left(K + \frac{2n}{a} \pi \right)^2 : \text{ DELLE PARABOLE DI UGUALI AMPIZZA, TRASLATO DI } \frac{2\pi}{a}$$

Gli stati dell'elettrone caratterizzati da un K da differenze di $\frac{2n}{a}\pi$, sono equivalenti.

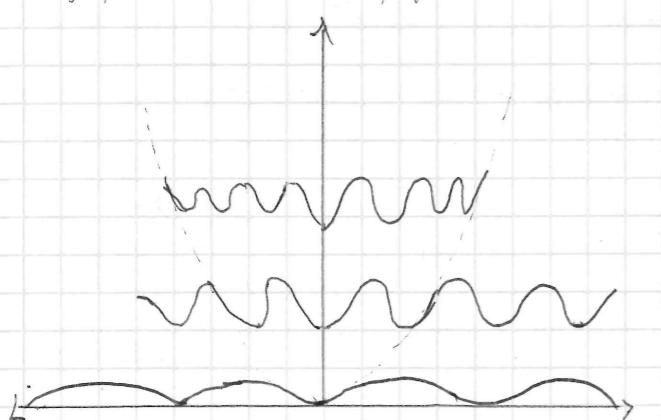
E' sufficiente studiare i casi per $-\frac{\pi}{a} \leq K \leq \frac{\pi}{a}$: la "prima zona di Brillouin"; una volta noto:

$$\begin{cases} \Psi, \Psi(K; x) & \text{lo stato dell'elettrone è} \\ E = E(K) & \text{perfettamente noto.} \end{cases}$$

Ritorniamo alla relazione che lega E a K :

$$p = \frac{\hbar m(dz)}{2a} + G_S(dz) \cdot G_S(Ka) \quad p = \frac{m \cdot dz}{\hbar^2} V_0$$

Il grafico $E-K$ in figura soprastante è detto "delle zone periodiche".

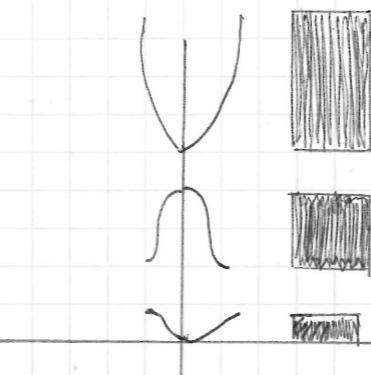


Ha rappresentato, qui.

Il grafico fa "intuire" che le zone di energia possibili per l'elettrone sono delimitate dalla condizione $G_S(Ka) = \pm \frac{\pi}{2}$.

$$Ka = n\pi \quad K \leq \frac{n\pi}{a} \quad n = \pm 1, \pm 2$$

La parabola tratteggiata percorre bene le sinusoidi, tranne che in certi punti, dove divergono. Queste sono la rappresentazione delle bande proibite.



In realtà sono le bande dove ci sono livelli energetici permessi, in bianco, zone proibite.

Questo è detto "schema delle zone violate".

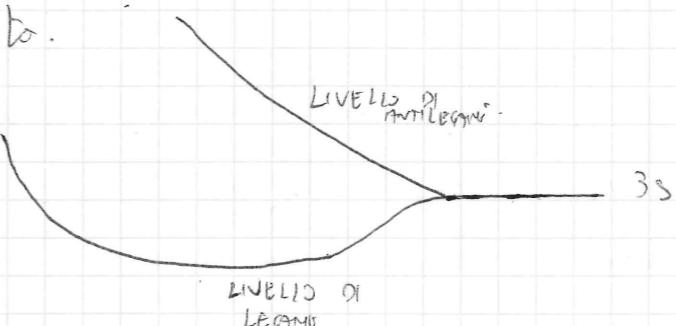
E' solo una rappresentazione alternativa, della "delle zone estese".

Senza abbiamo studiato l'ipotetica influenza di nuclei privi di elettroni posti in catena in di un reticolo unidimensionale.

Studiamo ora il caso di nuclei con elettroni: ci chiediamo quali stati potranno occupare gli elettroni portati dietro dai suoi atomi.

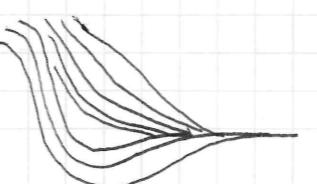
Prendiamo per esempio due atomi di zodiaco (Na): essi hanno 12 elettroni ciascuno, quindi tutti gli orbitali occupati fino al $2p$, e 1 elettrone nel $3s$.

Se uniriammo i due atomi, avremo qualcosa di interessante proprio nel $3s$: ci sarà un livello completamente occupato, e uno completamente vuoto.



Nel livello di antileggato, ci sarà un minimo ben pronunciato. Gli elettroni per questo tenderanno ad andar lì.

Se uniamo più di 2 atomi di zodiaco, questo $3s$ si spilleggerà in più di due livelli, ovvi, in una banda approssimativamente continua.



In realtà, anche gli altri livelli tendono a spartirsi, ma, perché sentono maggiormente l'influenza del nucleo, questa tendenza di separazione è minore.

Prendiamo ora del carbonio: esso dispone di 6 elettroni, 2 nel 1s, 2 nel 2s, 2 nel 2p. Nel livello m-2, abbiamo 4 stati occupati e 6 liberi.

Quando gli "atomi di C si uniscono per formare un cristallo, la banda a più alta energia si divide in due bande, con molti dei livelli vicini. Tra le due, vi sarà una zona proibita, detta energy gap.

Nel silicio c'è qualche stato molto simile, per n-3: 4 stati liberi, 6 occupati. Anche qua vi formano due bande, con molti dei livelli vicini. La banda a energia superiore è detta "banda di conducibilità", ed è vuota. L'altra, a livello inferiore, è detta "banda di valenza". Tra le due c'è sempre un energy gap, ma che sarà inferiore rispetto a quello del carbonio.

Da tutte queste osservazioni, possiamo trarre alcune conclusioni: sono i più atomi a fornire una molecola, solo gli elettroni più esterni vengono interessati alla formazione di bande. Solo gli elettroni più esterni, ovvero quelli che occupano livelli energetici a un maggior numero nel complesso meccanismo dei legami chimici.

Distinguiamo, ora, tre grandi categorie di elementi, mediante la teoria delle bande: metalli, semiconduttori, isolanti.

Si chiamano "metalli" i materiali in cui i livelli più esterni si combinano a fornire un'unica banda solo parzialmente piena, oppure due bande, una piena e una vuota, ma che si sovrappongono.

~~Si chiamano "semiconduttori" e "isolanti" i materiali in cui si formano due bande, una interamente piena e una interamente vuota, ma separate da energia, ovvero con un "energy gap"; una zona proibita tra le due. Se questo gap è piccolo, allora è un semiconduttore; se è grande, allora si parla di un isolante.~~

Allora finora studiato un particolare problema per una singola particella. Ci impareremo ora di estendere queste conoscenze matematiche per una singola particella, in sistemi di molte particelle, utilizzando poi anche l'influenza della temperatura T: faremo così mediante la meccanica statistica. Essa si basa su un ipotesi fondamentale: "tutti gli stati hanno eguale probabilità di essere occupati". Così che stiamo, è "quante particelle stanno in un singolo livello energetico", ovvero, quanti appartengono allo stesso intervallo dell'energia.

Cioè devo contare e studiare quante particelle N_i sono state di un'energia E_i. Risolviamo dunque i problemi su di una singola particella, determinare quanti stati gli saranno ammessi per ogni energia di particella E_i, e assumere che, senza ulteriori aggiustature, tutti gli stati hanno la stessa possibilità di essere occupati.

Possiamo dunque definire tutti i possibili modi con cui distribuire N_i particelle in gn stati: $\Omega = \frac{N!}{\prod_i N_i!} \pi^{N_i}$

Ansta deve però avere un massimo, cioè un punto con maggiore probabilità di equilibrio.

Approssimiamo con la formula di Stirling:

$$\ln(\omega(N_i)) \text{ è massimo quando } \frac{d}{dx} \{\ln[\omega(N_i)]\} = 0.$$

$$\ln(x!) = x \ln x - x + 1$$

$$N_i = A \cdot g_i e^{-\beta E_i} \quad (\text{Distribuzione di Maxwell-Boltzmann})$$

$$\beta = \frac{1}{k_B T} \quad A = \frac{N}{Z}$$

Possiamo esportare in quantistica la distribuzione di Maxwell-Boltzmann, tenendo conto di alcuni fattori; immaginiamo di voler studiare un fenomeno interpretabile mediante molti oscillatori armonici quantistici. Ognuno di questi, sarà energia dipendente da n_i .

$$E_n = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right).$$

Relazione fra media delle energie:

$$\langle E \rangle = \frac{\hbar \omega}{2} + \frac{\hbar \omega}{e^{\frac{\hbar \omega}{kT}} - 1} = \frac{\hbar \omega}{2} \cdot \langle \text{Numero quanti} \rangle.$$

$\langle \text{Numero quanti} \rangle$ è il numero medio di quanti di energia presenti per un singolo oscillatore, ossia la popolazione dei diversi livelli di energia. Questa legge è valida per tutti i bosoni.

$$\langle N_{\text{quant}} \rangle = \frac{1}{e^{\frac{\hbar \omega}{kT}} - 1} \cdot g_i \quad \text{è detta "distribuzione di Bose-Einstein".}$$

g_i indica il livello di degenerazione del livello energetico.

Mediante questa, è possibile risolvere il problema del corpo nero.

Gli elettroni però non sono bosoni, bensì fermioni, e hanno un ulteriore vincolo, detto dal principio di Pauli: uno stato quantistico non può essere occupato da più di una particella, se si parla di fermioni.

Vogliamo dunque trovare da ora la distribuzione di probabilità $f(E_i, T)$ con uno stato di energia E_i e una temperatura T . Introduciamo dalla termodinamica l'energia libera F :

$$F = U - TS \quad : U = \text{energia interna}; S = \text{entropia}; T = \text{temperatura}.$$

$$\Delta F = \sum_i \frac{\partial F}{\partial n_i} \delta n_i = 0; \quad \sum_i \delta n_i = 0.$$

$$\frac{\partial F}{\partial n_i} = \mu_i = \text{POTENZIALE CHIMICO}.$$

$$n_i = g_i \left[\frac{1}{e^{\frac{(E_i - \mu_i)}{kT}} + 1} \right] \quad \text{Distribuzione di Fermi-Dirac.}$$

μ_i in questi casi è l'energia di Fermi, E_F . Essa è l'energia massima che gli elettroni possono avere; ci spiegheremo meglio.

Questa distribuzione di Fermi rappresenta la probabilità che uno stato ad energia E venga occupato da particelle quantistiche non indiscernibili che rispettino il principio di Pauli.

Possiamo pensare agli elettroni come un "gas", do segno la distribuzione di Fermi-Dirac.

Studiamo ora meglio sulle applicazioni di tali distribuzioni, e cerchiamo di meglio comprendere l'utilità.

Tentiamo di studiare il gas di elettroni all'interno di una buca di potenziale. Gli elettroni in un metallo sono quasi liberi di muoversi;

la funzione d'onda avrà forma

$$\psi(x) = \left(\frac{1}{L}\right)^{\frac{3}{2}} e^{i\vec{k}x} \Rightarrow \text{In tre dimensioni: } \psi(\vec{r}) = \left(\frac{L}{L}\right)^{\frac{3}{2}} e^{i\vec{k}\vec{r}}, \text{ dove}$$

\vec{k} è il vettore d'onda, è un vettore perpendicolare

$$\Psi(x; y; z) = \Psi(x+L; y+L; z+L)$$

Studiamo il caso nondimensionale:

$$\Psi(x) = \Psi(x+L) \Rightarrow e^{inx} e^{ik(x+L)} = e^{inx} e^{ikx} e^{ikL}$$

e deve essere uguale a 1 per impostare la periodicità.

$$e^{i\vec{k}L} = 1 \Rightarrow e^{i\vec{k}L} = e^{i\vec{n}L} = e^{i\vec{m}(2\pi)}$$

$$e^{i\vec{k}L} = L \Rightarrow e^{i\vec{k}L} = e^{i\vec{n}L} = e^{i\vec{m}(2\pi)} \Rightarrow n(2\pi) = kL$$

$k = n \frac{2\pi}{L}$: Ogni stato, ogni vettore d'onda, ha una posizione

discreta, ben precisa, ovunque distante dall'altra $\frac{2\pi}{L}$.

Arrò dunque punti equipotenziali.

Stessa cosa vale nello spazio, con \vec{k} vettore.

Ad ogni \vec{k} può associare un'energia:

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

Si parla di sfera di Fermi: si tratta della sfera nello spazio dei \vec{k} (vettori d'onda), tali per cui $E(\vec{k}) = E_F$.

All'0 assoluto, tutti gli elettroni stanno dentro la sfera di Fermi, e tutti gli "spazi" interni sono dunque occupati dagli elettroni.

Li poniamo una domanda: quanti stati elettronici possono essere riempiti dentro un materiale? Per ripetere a noi, avremo bisogno di due meno: $f(E; T)$, e $g(E)$: la distribuzione di Fermi-Dirac e

la densità energetica di elettroni $g(E)$: quanti elettroni occupano un livello energetico.

Supponiamo di conoscere il numero di atomi per unità di volume: abbiamo N atomi, ciascuno con s elettroni. Per volume, avremo

$$\frac{L}{2} (3NL^3) \text{ STATI TOTALI RAPPRESENTABILI, CON VALORI DISCRETI, IL CUI MASSIMO È L'ENERGIA DI FERMI.}$$

$$N_F = N \text{ Sab. de } E(K_F) = E_F$$

$$V_K = 3\lambda_L \cdot \Delta k \cdot \Delta k_F = \left[\frac{2\pi}{L}\right]^3$$

$$\text{Nella sfera di Fermi, avremo } \frac{N_F}{V_K} = \frac{\frac{4}{3}\pi k_F^3}{\left[\frac{2\pi}{L}\right]^3} = \frac{\frac{4}{3}\pi \left[\frac{2\pi}{E_F}\right]^3}{\left[\frac{2\pi}{L}\right]^3} = \frac{\frac{4}{3}\pi \left[\frac{2\pi}{\hbar^2 k_F^2}\right]^3}{\left[\frac{2\pi}{L}\right]^3}$$

Ogni stato avrà per 2 elettroni di spin opposto.

$$\Rightarrow \frac{L}{3} \left(\frac{2\pi}{\hbar^2 k_F^2}\right)^{\frac{3}{2}} E_F^{\frac{3}{2}}$$

In condizioni di equilibrio, non avremo niente. Tutti gli elettroni stanno nella sfera, e non c'è condensabilità.

Si verifica ora un'importante legge empirica e sali spazientibili: la condensabilità $\sigma(T)$ viene sperimentalmente come $\frac{C}{T}$, o come $\frac{1}{T^5 + N_{\text{max}}}$ per lese T e N-n - concentrazione di impurità;

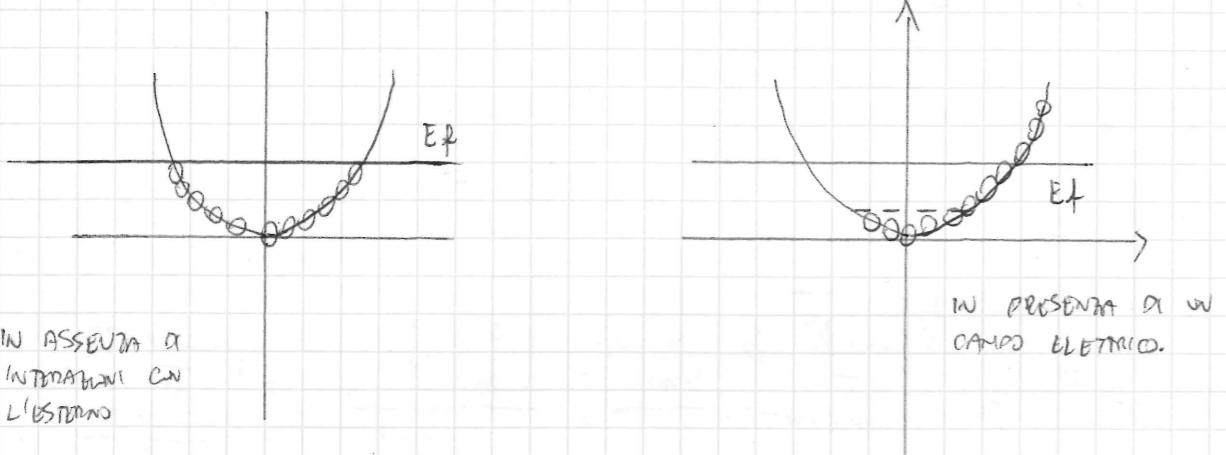
$$\text{Nel modello classico di Drude, } \sigma = \frac{N_F e^2 \beta}{m}, \beta = \text{tempo fra un}$$

Applichiamo il modello quantistico di Bethe-Sommerfeld:

$$\vec{p} = \hbar \vec{k} = m \vec{v} \text{ (relazione di De Broglie).}$$

$$V_F = \frac{\hbar \pi^{\frac{2}{3}} (3N_F)^{\frac{1}{3}}}{m}$$

Determiniamo mediante un modello come la condutibilità in una dimensione a T=0K:



Notiamo che nella prima figura, ogni elettrone ha il suo corrispondente allo stesso livello di energia. Qui, non ci è condizionato. Nel secondo caso, il campo elettrico compie la funzione; tutti gli elettroni si troveranno spostati, saranno coinvolti nella conduzione, nello stesso livello di energia anche sotto al livello di Fermi, perché sono spostati.

$$j_x = \sigma E_x = -N_{e,F} V_F \cdot e \quad (\text{densità di carica})$$

$$N_{e,F} \sim g(E_F) \Delta E \sim g(E_F) \left[\frac{\Delta E}{\hbar k_F} \right] \Delta k_F$$

$$E = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \cdot \frac{\Delta E}{\Delta k_F} \cdot \frac{\hbar k_F}{m} \cdot \frac{\hbar}{m} p_F = \hbar v_F \vec{p}_F$$

$$\Delta k_F = \frac{eE}{\hbar v_F} \Rightarrow \Delta k_F = \frac{eE}{\hbar} \vec{z}$$

Nel caso bidimensionale ci sono 2 libere è una persona sull'isola; si sposta il baricentro della sfera; poniamo qualcosa così, considerando al posto della sfera di Fermi nello spazio dei vettori d'onda \vec{k} ,

la sfera nello spazio delle velocità \vec{v} .

$$\delta \vec{v} = \frac{e \cdot \vec{E}}{m} \vec{z} \quad (\text{TRASLAZIONE DELLE SFERE}).$$

Alla conduzione parteciperanno solo gli elettroni della zona in prossimità dell'energia di Fermi:

$$g(E_F) \cdot \Delta E$$

$$j_x = e \vec{v}_{F,F} \cdot g(E_F) \Delta E \Rightarrow g(E_F) \frac{\Delta E}{\Delta k_F} \Delta k_F$$

$$\frac{\Delta E}{\Delta k_F} = \frac{\hbar^2 k_F}{m} = \frac{\hbar}{m} p_F = \hbar v_{F,F}$$

$$\delta \vec{v}_x = \frac{e \vec{E}}{m} \vec{z} \Rightarrow \Delta k_x = \frac{e \vec{E}}{\hbar} \vec{z}$$

$$j_x = e^2 \left(\frac{e \vec{E}}{\hbar v_{F,F}} \right)^2 N(E_F) \vec{E} \cdot \vec{z}$$

A questo punto, introduciamo la meccanica statistica.

Innanzitutto, si vuole fare una precisazione: quando si parla di "arti in quantistica" non si parla di "carbotti" nel vero senso della parola: con una certa T , i nuclei vibrano, ed emettono fononi; questi perturberanno lo stato degli elettroni. Maggiore sarà T , maggiore saranno le vibrazioni, e dunque le perturbazioni. Si parla dunque di interazioni tra elettroni e fononi "emessi" dal nucleo.

Finora abbiamo considerato $T=0$; in questo caso, la sfera di Fermi è integralmente occupata. Quando introduce una $T>0$, deve seguire la meccanica statistica, e nel particolare la distribuzione di Fermi-Diaco-

$$f(E, T) = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{kT}} + 1}$$

Abbiamo bisogno di 2 dati: la densità di elettroni in un certo livello energetico, $g(E)$, e la "funzione di occupazione", una

la $f(E; T)$. Il numero di elettroni sarà dato da:

$$N(E) = g(E) f(E; T) = \frac{\frac{L^3}{2\pi^2} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} E^{\frac{1}{2}}}{e^{\frac{E-E_F}{kT}} + 1}$$

A questo punto, conosciamo:

- Il numero N di atomi
- Il numero s di elettroni per atomo
- Il numero w di stati non occupati del sistema (non di stati liberi, potenzialmente occupabili, per $T > 0$).

$s+w$ = Numero totale degli stati occupabili. Dati N atomi, abbiamo

$\chi N / (s+w) N$ stati occupabili o già occupati (s occupati, w occupabili).

Nel caso dei metalli, non esistono zone non occupabili.

Nel caso di semiconduttori o isolanti, abbiamo un gap di energia, non occupabile.

Della E^* l'energia massima, possiamo anche dire che

$$N(s+w) = \int_0^{E^*} g(E) dE$$

Per $T=0$, l'energia massima degli stati occupati è l'energia di Fermi.

$$BN = \int_0^{E_F} g(E) dE = \frac{L^3}{3\pi^2} \left[\frac{2m^*}{\hbar^2} \right]^{\frac{3}{2}} E_F^{\frac{3}{2}}$$

$$E_F = \left[\frac{3\pi^2 BN}{L^3} \right]^{\frac{2}{3}} \frac{\hbar^2}{2m^*}$$

Il nostro obiettivo è trovare un modello quantistico della conduttilità elettrica.

$$\text{Per } T=0K, \sigma = \frac{e}{3} e^2 v_F g(E_F) \beta$$

Questo β è il tempo tra un "atto" e un altro. Allora è ovvio, non abbiamo fenomeni di interazione che producono il generarsi di buoni. Da cosa dipende allora il β ? Dai difetti e dalle impurità che "rovinano" la periodicità del reticolo. Si può dire che

$$\beta \approx \frac{e}{N_{imp}} = \frac{e}{N_{imp}} \cdot \text{Numero di impurità del materiale.}$$

Non meno che si trovano impurità, il tempo di interazione calerà, e questo senza effetti della temperatura. Questi saranno da considerare in un secondo momento.

Per fare così, riprendiamo alcune nozioni fondamentali:

$$\sigma = \frac{e}{3} e^2 v_F^2 n E_F \beta \quad \beta = \text{tempo di attacco tra un "atto" e un altro}$$

$$g(E) = \frac{L^3}{2\pi^2} \left[\frac{2m^*}{\hbar^2} \right]^{\frac{3}{2}} E^{\frac{1}{2}} \quad m^*: massa efficace (ancora da definire)$$

$$f(E; T) = \frac{e}{e^{\frac{E-E_F}{kT}} + 1} \quad \text{Distribuzione di Fermi - Dirac}$$

Per $T > 0$, β dipenderà non solo da N_{imp} , ma anche dalla temperatura.

$\sigma \propto \beta(T; N_{imp})$: la conduttilità è proporzionale al β , in funzione di T e del numero di impurità.

Abbiamo già visto che meno il materiale è puro, meglio sarà

la probabilità di anti, ovvia la loro frequenza.

Parlare di anti, come forse già accennato, è ingenuo: è quasi impossibile che due elementi si trovino a collidere nel vero senso della parola. Ciò che capita è che gli elementi, sottoposti ad un aumento di temperatura, iniziano a vibrare, perdendo energia sotto forma di fonni: bosoni che trasmettono ad un elemento gli effetti della vibrazione degli altri elementi. Essendo bosoni, questi si studieranno con la statistica di Bose-Einstein. A seconda della frequenza ω , vi sarà distribuzione bosonica

$$f(\omega; T) = \frac{e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}}}{e^{-1}}. \quad \text{Per alte temperature, } kT \gg \hbar\omega, \text{ quindi}$$

possiamo approssimare a:

$$f(\omega; T) \sim \frac{kT}{\hbar\omega}.$$

Questa è solo la formazione di occupazione dei bosoni per quantificare l'energia, semiretta anche una formazione di densità di stati dei fonni.

Parliamo ora di conduttilità nel metallo, per arrivare alla definizione di "massa efficace": in due parole, si tratta della massa della particella, intesa come "quasi libera", che viaggia nel metallo.

Interpretiamo meglio: abbiamo un elettrone in un cristallo, sosculto da una funzione d'onda $\Psi(\vec{x}; t)$ e da un vettore d'onda \vec{k} , in un campo elettrico \vec{E} . In un tempo δt , quest'ultimo interagisce $\delta E = -e \cdot \vec{E} \cdot \vec{v} \delta t$; $\delta \vec{p} = S(\hbar \vec{k}) = -e \vec{v} \delta t$.

$$\text{Ma quindi, } S(\hbar \vec{k}) = -e \vec{v} \delta t, \quad \delta E = \hbar \vec{k} \cdot \vec{v} \delta t.$$

Consideriamo che di solito l'energia è funzione del vettore d'onda, \vec{k} .

$$E(\vec{k}) = S(E(\vec{k})) = \frac{\partial E}{\partial \vec{k}} S(\vec{k}) = \vec{v}_k(E(\vec{k})) S(\vec{k}) = \hbar \vec{k} \cdot \vec{v}.$$

Da ciò,

$$\hbar \vec{v} = \vec{v}_k(E(\vec{k}))$$

Dimostriamo ora che il vettore stesso ha un certo effetto sull'elettrone.

Studiamo un caso semplificato, monodimensionale.

$$v_x = \frac{e}{\hbar} \frac{\partial E(\vec{k})}{\partial k_x}$$

Abbiamo ottenuto la velocità; deviamola ulteriormente.

$$\frac{dv_x}{dt} = a_x = \frac{e}{\hbar} \frac{d}{dt} \frac{\partial E(\vec{k})}{\partial k_x} = -\frac{e C_x}{m^*} =$$

Abbiamo combinato le leggi sul campo elettrico, dove $\vec{F} = -e \vec{E}$, e la legge di Newton: $\vec{F} = m \cdot \vec{a}$, m^* , detta "massa efficace", e la massa che permette di trattare l'elettrone, con la legge di Newton. Perchiamo di riavere m^* .

$$= -\frac{e C_x}{m^*} = \frac{e}{\hbar} \frac{\partial^2 E(\vec{k})}{\partial k_x^2} \cdot \frac{\partial k_x}{\partial t}$$

$$\text{Ma } \vec{F} = \frac{d \vec{p}}{dt} \quad \vec{p} = \hbar \vec{k}_x$$

$$= \frac{e}{\hbar} \frac{\partial^2 E(\vec{k})}{\partial k_x^2} \left[\frac{-e C_x}{\hbar} \right] \quad |$$

$$\frac{1}{m^*} = \frac{e}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(\vec{k})}{\partial k_x^2} \quad | \quad m^* = \frac{\hbar^2}{\frac{\partial^2 E(\vec{k})}{\partial k_x^2}}$$

Questa è la rappresentazione monodimensionale della massa efficace.

In tre dimensioni, la massa efficace ha carattere tensoriale: essa si ricava in questo modo:

$$\left(\frac{1}{m^*}\right)_{ij} \cdot \frac{e}{\hbar^2} \frac{\delta^2 E(\vec{k})}{\delta k_i \delta k_j} \quad ; \quad \vec{a} = \left(\frac{e}{m^*}\right)_{ij} \times \vec{p}$$

Intuitivamente la massa efficace varia a seconda del vettore, o, meglio, a seconda della sua derivata seconda spaziale, delle sue concordanze.

In alcuni reticolati particolarmente regolari, come i reticolati di Bravais, il tensore di m^* è diagonale rispetto alle coordinate di riferimento, poniamo considerare l'accelerazione esattamente parallela alla forza applicata. Normalmente, ciò non avviene.

Muovendosi da uno stato quantico ad un altro, in effetti varia, di fatto, la sua massa efficace.

Applicando m^* , poniamo considerare come libera la particella, ed applicare la seconda legge di Newton.

Studiamo, ora, la conduttilità elettrica, considerando T

$$J = -e \vec{J}(\vec{k}) \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} \frac{1}{L^3}. \quad \text{Ma } \vec{J} = \frac{e}{\hbar} \vec{\nabla}_k [E(\vec{k})].$$

$$J = -\frac{e}{\hbar 8\pi^3} \left[\vec{\nabla} E_k(\vec{k}) \right] d\vec{k}$$

• $-e \vec{J}(\vec{k})$ è la velocità in funzione di \vec{k}
 come gradiente dell'energia
 • $\frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3}$ è il numero di elettroni che
 occupano il volume $d\vec{k}$

Intepriamo:

$$\vec{J} = -\frac{e}{\hbar 8\pi^3} \int \left[\vec{\nabla}_k [E_k(\vec{k})] \right] d\vec{k}$$

I zone
di Brill.

In assenza di campo elettrico, $E(\vec{k}) = E(-\vec{k})$, $\vec{J}(-\vec{k}) = -\vec{J}(\vec{k})$, $J = 0$.

Considerando una variazione di temperatura T , dovremo considerare anche la distribuzione di Fermi-Dirac, quindi

$$\vec{J} = -\frac{e}{\hbar 8\pi^3} \int f(\vec{k}; T) [\vec{J}(\vec{k})] d\vec{k}$$

Considerando anche un campo elettrico \vec{C} , nel blocco L^3 ,

$$f_0(\vec{k}; T) = \frac{1}{e^{\frac{E(\vec{k}) - E_F}{k_B T}} + 1}$$

Il vettore d'onda sarà una variazione:

$$\vec{k} \rightarrow \vec{k} + \frac{e}{\hbar} \vec{B} C = \vec{s} \vec{k}$$

La Fermi-Dirac dovrà anche tenere conto di questa variazione $\vec{s} \vec{k}$.

$$f(\vec{k}; T) \approx f_0\left(\vec{k} + \frac{e}{\hbar} \vec{B} C; T\right)$$

Sviluppando con Taylor,

$$f(\vec{k}; T) \approx f_0(\vec{k}; T) + \left(\frac{e}{\hbar} \vec{B} C \right) \vec{\nabla}_k f_0(\vec{k}; T)$$

$$\vec{J} = J \cdot \vec{C} = -\frac{e}{8\pi^3} \int f(\vec{k}) \vec{J}(\vec{k}) d\vec{k} = -\frac{e}{8\pi^3} \int \left[f_0(\vec{k}) + \left(\frac{e}{\hbar} \vec{B} C \right) \vec{\nabla}_k f_0(\vec{k}) \right] \vec{J}(\vec{k}) d\vec{k}$$

solo x!
 $\Rightarrow -\frac{e^2}{8\pi^3} \int \left[\frac{\partial f_0(\vec{k})}{\hbar} \frac{\partial \vec{J}(\vec{k})}{\partial k_x} \right] v_x(\vec{k}) d\vec{k}$

Ma $\frac{\partial f_0(\vec{k})}{\partial k_x} = \frac{\partial f_0(\vec{k})}{\partial E} \cdot \frac{\partial E}{\partial k_x} = \frac{\partial f_0(\vec{k})}{\partial E} + v_x$

$$J_x = -\frac{e^2}{8\pi^3} \int \frac{\partial f_0(\vec{k})}{\hbar} \frac{\partial \vec{J}(\vec{k})}{\partial E} v_x(\vec{k}) d\vec{k}$$

$$\text{Ma } \frac{\delta f_0(\vec{k})}{\delta E} = -\delta(E - E_F).$$

$$\Rightarrow + \frac{e^2}{8\pi^3} \int [8C_x \delta(E - E_F) v_x^2] d\vec{k}$$

Ma si dimostra che $\vec{F}(\vec{k}) \parallel d\vec{u}_\perp$, ossia alla componente \perp di $d\vec{k}$.

$$d\vec{k} = dS_E d\vec{u}_\perp = dS_E \frac{dE}{\hbar v(\vec{k})}.$$

$$J_x \sim \frac{e^2}{8\pi^3} \int [8C_x \delta(E - E_F) v_x^2] d\vec{k} = \frac{e^2}{8\pi^3} \int [8C_x \delta(E - E_F) \frac{v_x(\vec{k})^2}{\hbar v(\vec{k})}]$$

$$J_x \sim \frac{e^2 C_x}{8\pi^3} \int dS_E \left[\delta(\vec{k}_F) \frac{v_x(\vec{k}_F)^2}{\hbar v(\vec{k}_F)} \right]$$

superficie
di Fermi

Condensano 6 non variante con \vec{k} .

Da ciò:

$$\hbar \vec{k}_F \sim m^* \cdot \vec{v}(\vec{k}_F) \Rightarrow \hbar \vec{k}_F = m^* \cdot \vec{v}(\vec{k}_F)$$

Integrando, e sostituendo, ottengono:

$$dS_E = k_F^2 \sin \theta d\theta d\phi$$

$$v_x(\vec{k}_F) = v(\vec{k}_F) \mid \sin \theta \cos \phi$$

$$J_x \sim \frac{e^2 C_x^2}{8\pi^3 m^*} k_F^3 \int \sin^3 \theta \cos^2 \phi d\theta d\phi$$

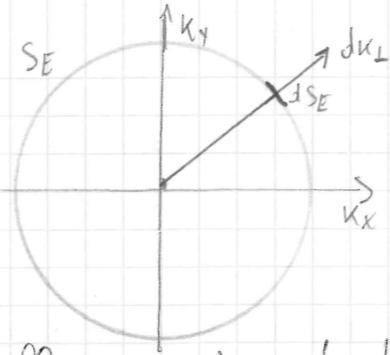
angolo
solido

$$J_x \sim \frac{e^2 C_x^2}{8\pi^3 m^*} k_F^3 \frac{4}{3} \frac{4}{3} \pi \quad \text{Ma } \frac{4}{3} k_F^3 \cdot \frac{e}{8\pi^3} = n.$$

$$J_x \sim \frac{e^2 \delta}{m^*} n \cdot C_x \rightarrow \delta C_x = n \cdot e \cdot \mu \cdot c$$

$$\sigma = \frac{e^2 \delta}{m^*} n \quad | \quad \mu = \frac{e \delta}{m^*} \quad \sigma: \text{conduttilità elettrica}$$

$n: \text{densità di elettroni}$



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

$$g(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} E^{\frac{1}{2}} = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{\hbar R}{[2m]^{\frac{1}{2}}}$$

$$\sigma = \frac{e^2}{3} g(E_F) f(E_F; T) \delta v_p^2 : \text{si ricava anche se la Fermi-Dirac}$$

Semiconduttori

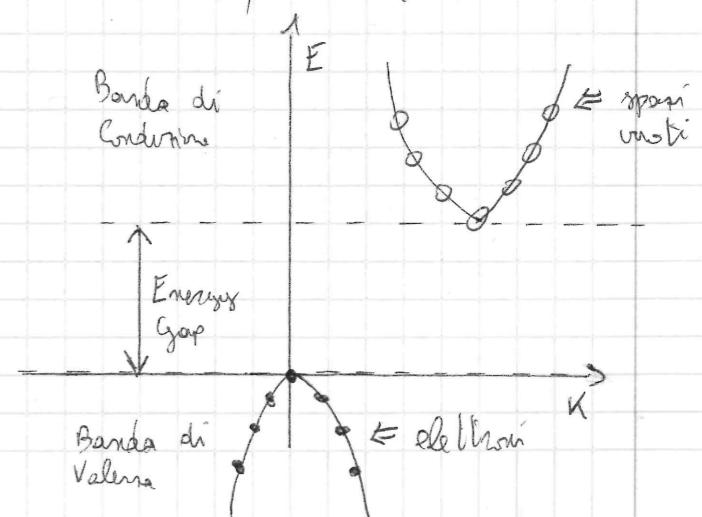
I semiconduttori sono una categoria di materiali che, a differenza dei metalli, possono avere aumentare conduttilità, con l'aumentare di T. Vedremo però, al termine della trattoria, che l'aumento della $\sigma(T)$ non è univoco.

I semiconduttori presentano portatori di carica sia positivi che negativi. Inoltre, i semiconduttori presentano delle bande, come vedremo.

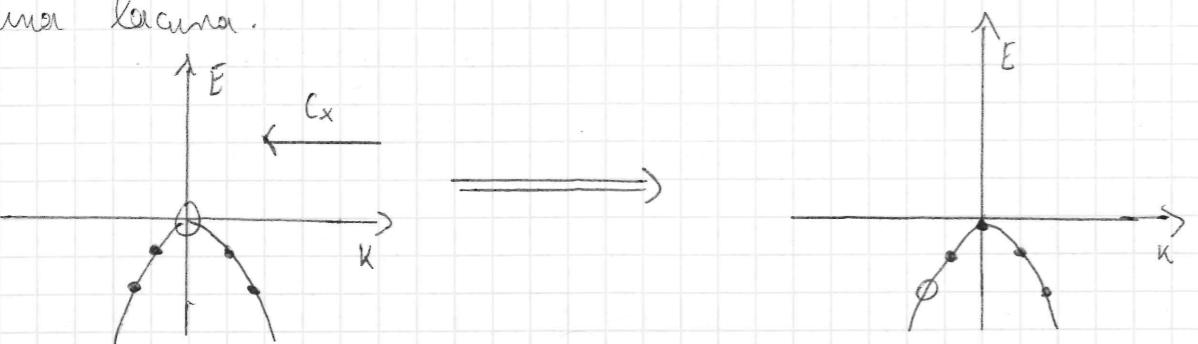
Abbiamo già visto che, con un campo elettrico, \vec{E} , possiamo sbilanciare la distribuzione di elettroni nei metalli. Nei semiconduttori, con un campo \vec{E} non molto intenso, non capita nulla. Questo perché, nei semiconduttori, esistono stati proibiti, non occupabili, quindi non può avvenire per \vec{E} di intensità "standard", conduzione.

Esistono tre zone da considerare:

- Bande di valenza: piena di elettroni
- Energy Gap: stato proibito
- Bande di conduzione: banda vuota, che è riempita, permette la conduzione.



Immaginiamo che un elettrone riesca a trarre, per effetto di qualche interazione (come un campo elettrico, C_x), dalla banda di valenza a quella di conduzione. Si creerà, in banda di valenza, una lacuna.



La lacuna, ovvero lo "spazio vuoto", si può considerare come una carica positiva. Dato C_x , allora, la lacuna tenderà a spostarsi nel verso del campo. Di fatto, però, possiamo trattare anche le lacune, come trattavamo gli elettroni nel caso dei metalli. Ciò deve permettere la conduzione, dunque, saranno:

- gli elettroni in banda di conduzione
- le lacune in banda di valenza.

Il fatto che a temperatura ambiente passi una quantità infinitesima di corrente elettrica, che per $T \rightarrow 0$, $j \rightarrow 0$, e che all'aumentare di T , aumenti tendenzialmente anche j , possiamo pensare che E_F stia nell'energy gap.

Se un elettrone arriva in banda di conduzione, possiamo pensarlo come libero, o dunque

$$g_c(E) = \frac{L^3}{2\pi^2} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} E^{\frac{1}{2}} \quad (\text{come in un metallo}).$$

Quale sia di ruolo per la lacuna in banda di valenza: si crea

un'asimmetria, tale per cui vi ha una carica, positiva, anche in banda di valenza, con densità $g_V(E)$

$$g_V(E) = \frac{L^3}{2\pi^2} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} (E_V - E)^{\frac{1}{2}}$$

Possiamo pensare alla $g_C(E)$, ovvero densità in banda di conduzione, come:

$$g_C(E) = \frac{L^3}{2\pi^2} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} (E - E_C)^{\frac{1}{2}}$$

Consideriamo le g_C e g_V come in funzione anche di E_V , ovvero la massima energia della banda di valenza, e di E_C , ovvero la minima energia in banda di conduzione.

N.B.: anche la m^* , ovvero la massa efficace della lacuna, è maggiore di zero: corrisponde verso il basso, e carica positiva.

Avendo a disposizione molte lacune, o molti elettroni liberi, avremo corrente nel semiconduttore.

Alliamo trovato un'espressione della densità degli stati; consideriamo ora la funzione di distribuzione, ovvero la Fermi-Diag.

$$f(E; T) = \frac{L}{e^{\frac{E-E_F}{kT}} + 1} \sim e^{\frac{E-E_F}{kT}}, |E - E_F| \gg 2kT.$$

$$N_C(E) = g_C(E) f(E; T)$$

$$N_{C,0} = \int_{E_C}^{+\infty} g_C(E) f(E; T) dE = \frac{L^3}{4} \left[\frac{2m^* k T}{\pi \hbar^2} \right]^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{(E_C - E_F)}{kT}} \quad \begin{bmatrix} \text{Numero di elettroni} \\ \text{in banda di} \\ \text{condut} \end{bmatrix}$$

In banda di valenza, non avrà stati pieni con corrente positiva, ma lacune, ovvero stati vuoti. Dovrà dunque considerare, come funzione di distribuzione, non la Fermi-Diag, ma la sua complementare.

$$N_v(E) = g_v(E) \left(1 - f(E/kT)\right) \approx g_v(E) \cdot e^{-\frac{E_F - E}{kT}}.$$

$$N_{h,v} = \int_{-\infty}^{E_F} g_v(E) \left(1 - f(E/kT)\right) dE = \frac{L^3}{4} \left[\frac{2m^* kT}{\pi \hbar^2} \right]^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{E_F - E}{kT}}.$$

Per semiconduttori ideali, non trattati, però, il numero di elettroni in banda si considera deve essere uguale a quello di lacune in banda di valenza. Da ciò,

$$N_{p,c} = N_{h,v}.$$

Possiamo ricavare, da ciò, l'energia di Fermi, in prima approssimazione.

$$e^{\frac{2E_F}{kT}} = \frac{N_{eff}^v}{N_{eff}^c} e^{\frac{(E_F + E_c)}{kT}}$$

$$E_F = \frac{(E_c + E_v)}{2} + \frac{kT}{2} \ln \frac{N_{eff}^v}{N_{eff}^c} = \frac{(E_c + E_v)}{2} + \frac{3}{4} kT \ln \frac{m_p^*}{m_n^*}$$

Il livello di Fermi sarà circa a metà tra le due bande.

Abbiamo l'ulteriore conferma del fatto che la conduttorità debba avere le parti:

$$\vec{J} = \sigma \cdot \vec{E} \Leftrightarrow \vec{J} = N_{cond} \cdot e \cdot \vec{V},$$

$$\vec{J} = (N_{p,c} \vec{V}_{p,c} e) + (N_{h,v} \vec{V}_{h,v} e)$$

Si usa definire due mobilità:

$$\mu_e = \frac{\vec{J}_e}{\vec{E}} ; \quad \mu_h = \frac{\vec{J}_h}{\vec{E}}$$

↓

$$\vec{J} = N_{ec} \mu_e e + N_{hv} \mu_h e$$

Ma, in semiconduttori intrinseci, i numeri di lacune ed elettroni coincidono.

$$N_{p,c} = N_{eff}^c = e^{-\frac{(E_c - E_F)}{kT}} ; \quad N_{h,v} = N_{eff}^v = e^{\frac{(E_F - E_v)}{kT}} ; \quad E_F \approx \frac{E_c + E_v}{2}.$$

$$N_{p,h} = \frac{L}{4} \left[\frac{2m^* kT}{\pi \hbar^2} \right]^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{E_g}{2kT}} \quad E_g = \text{energy gap}$$

$$\sigma = e \left(\mu_e + \mu_h \right) \frac{L}{4} \left[\frac{2m^* kT}{\pi \hbar^2} \right]^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{E_g}{2kT}}.$$

L'aumento di temperatura fa aumentare la probabilità di trovare appie lacune-elettroni, e quindi di condurre. Abbiamo detto che $\mu \xrightarrow[C]{\sigma}$.

Con l'aumentare della temperatura, per la legge di Ohm, ci venire da pensare che σ dovrebbe diminuire, e quindi anche μ , per l'aumento di foroni, come per i metalli. Meno, per ora, è in tema.

Poniamo dunque, come per i metalli, che

$$\mu = \frac{e \beta}{m^*}$$

Questo β sarà fondamentale; come nei metalli, il numero di "orbitali", ora di altri tipi, dipenderà dal numero di foroni, e dalla Bose-Einstein.

$$n_{foroni} = \frac{1}{\frac{\hbar \omega}{kT}^{-1}} \approx T, \quad \text{per } T \gg \hbar \omega.$$

$$\langle v \rangle \propto \sqrt{T}; \quad \text{Punti} \propto n_{foroni} \propto T \sqrt{T}.$$

$$\mu \propto T^{-\frac{3}{2}}$$

Ciò vale solo per semiconduttori non trattati, ed idealmente puliti.

Vediamo di più, con modifica la situazione, in determinate condizioni, potrà cambiare radicalmente.

Drogaggio dei semiconduttori

Abbiamo detto che la conduttilità dei semiconduttori è:

$$\sigma = N_{e,c} \mu_e + N_{h,v} \mu_h \cdot e$$

Le due varietà sono quantità dipendenti da T , e da E_g , che a sua volta dipende dal materiale semiconduttore. Ad esempio,

$$N_{e,h} = \frac{L}{4} \left[\frac{2m^* kT}{\pi \hbar^2} \right]^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{E_g}{2kT}} \quad \text{Nel silicio, } E_g = 1,1 \text{ eV.}$$

Siamo allora costretti a considerare i semiconduttori inquinati, non trattati.

$\mu \propto T^{-\frac{3}{2}}$. La conduttilità è molto bassa. Tuttavia, i semiconduttori opportunamente trattati, possono variare radicalmente le proprie proprietà. Tali processi, sono detti "processi di drogaggio di un semiconduttore".

Abbiamo, in modo intuitivo, due possibilità:

- 1) Aggiungere atomi con più elettroni di quelli del semiconduttore, e dunque aggiungere elettroni in banda di conduzione (drogaggio tipo "n")
- 2) Aggiungere atomi con meno elettroni di quelli del semiconduttore, e dunque aggiungere lacune in banda di valenza. (drogaggio tipo "p").

Prendiamo del silicio Si: il semiconduttore più usato negli ultimi vent'anni. Abbiamo due possibilità di drogaggio:

- 1) Aggiungere per esempio del fosforo P, dotato di 5 elettroni esterni.

4 elettroni serviranno per le legami, e 1 elettrone resterà spostato, libero di muoversi, per energia bassa, come quella portata da una T come la temperatura ambiente.

- 2) Aggiungere un atomo come il boro B, dotato di 3 elettroni esterni.

L'arricchimento di elettroni porterà nel sistema una carica positiva.

Per i drogaggi del silicio, dunque:

- Per il drogaggio tipo n, un atomo pentavalente va introdotto
- Per il drogaggio tipo p, un atomo trivalente va introdotto.

Possiamo pensare al sistema fosforo P come un "atomo di idrogeno equivalente": il P avrà carica positiva, e sposterà una carica negativa. Nel sistema idrogenoidi, però, ci sarà una sostanziale differenza: lì intorno a sé ha il vuoto, P intorno a sé ha una molecola di silicio.

Il livello fondamentale dell'atomo idrogenoidi, rispetto al vuoto, sarà:

$$E_L = \frac{m^* e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} = -13,7 \text{ eV}$$

m^* massa elettrone

ϵ_0 = costante dielettrica del vuoto

L'elettrone, però, non è nel vuoto, e va studiato con la sua massima efficienza, e con un dielettrico $\epsilon_r = 12$:

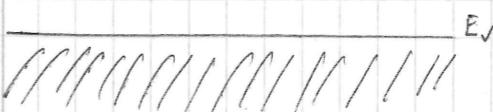
$$E_L = \frac{m^* e^4}{2(4\pi\epsilon_0\epsilon_r)^2 \hbar^2} = -0,05 \text{ eV.}$$

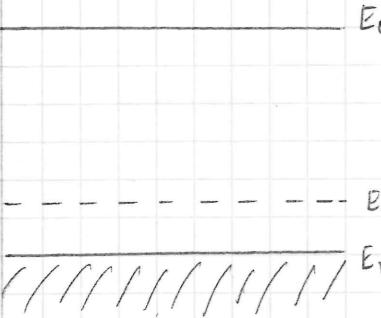
Questo rappresenta l'energia necessaria per muovere, nel silicio, un nostro elettrone.

Vediamo così:



Tra E_C ed E_V , si introduce, introducendo il fosforo P, un "livello donne E_F ", discreto. L'è indica il gap energetico.





Con il buco B , capita qualcosa di simile: si crea il livello di buco E_A , "livello accattivo".

N.B.: quando aggiungiamo una lacuna, o un elettrone, non aggiungiamo anche la sua controparte.

Come sempre, vale la distribuzione di Fermi-Dirac. Abbiamo però capire dove andrà a posizionarsi il livello di Fermi, E_F .

Abbiamo precedentemente visto, nel caso del semiconduttore intrinseco, che

$$N_{e,c} = N_{eff.}^c \cdot e^{-\frac{(E_C - E_F)}{kT}} \quad ; \quad N_{h,v} = N_{eff.}^v \cdot e^{+\frac{(E_C - E_F)}{kT}}$$

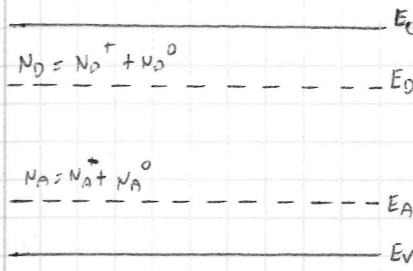
Vale la legge dell'anone di messa:

$$N_{e,c} \cdot N_{h,v} = K \cdot e^{-\frac{E_F}{kT}} \quad K \text{ costante.}$$

Questa legge, è valida anche nel caso di un semiconduttore drogato: il prodotto delle densità è invariato, ma le singole densità no: se, in un semiconduttore intrinseco, le densità ($N_{e,c}$ e $N_{h,v}$) sono uguali, in caso di droggaggio variano: se una aumenta, l'altra diminuisce in proporzione.

Studiamo la variazione del livello di Fermi in funzione del droggaggio.

Quando l'elettrone va in banda di conduzione, il livello dove si ionizza positivamente. Ciò vale anche per il livello accattivo, che si ionizzerà poi negativamente: la lacuna si riempie, e così il suo atomo si considera negativamente.



Gli atomi del livello donore saranno in totale un po' neutri (N_D^0) e un po' ionizzati positivamente (N_D^+). Idem per il livello accattivo, con N_A^- ed N_A^0 .

Applichiamo la statistica di Fermi-Dirac.

$$n_D = N_D^0 = N_D \left(1 + e^{\frac{(E_D - E_F)}{kT}} \right)^{-1} ; p_A = N_A^0 = N_A \left(1 + e^{\frac{(E_F - E_A)}{kT}} \right)^{-1}$$

n_D : densità di elettroni localizzati su atomi donori

p_A : densità di lacune su atomi accattivi. Si è lavorato con la complementare della Fermi-Dirac.

Si assume che gli elettroni in banda di conduzione, sono quasi tutti donori, ma non consideriamo effetti intrinseci del semiconduttore.

$$N_{e,c} \sim N_D^+ = N_D - N_D^0 = N_D \left(1 - \frac{1}{1 + e^{\frac{(E_D - E_F)}{kT}}} \right)$$

Dal caso intrinseco, abbiamo visto che

$$N_{e,c} = N_{eff.}^c \cdot e^{-\frac{(E_C - E_F)}{kT}} \implies \frac{N_{e,c}}{N_{eff.}^c} \cdot e^{\frac{E_C}{kT}} = e^{\frac{E_F}{kT}}$$

Da qui,

$$N_{e,c} \sim \frac{N_D}{1 + e^{\frac{(E_C - E_D)}{kT}} \cdot \frac{N_{e,c}}{N_{eff.}^c}}$$

$$N_{e,c} + \frac{[N_{e,c}]^2}{N_{eff.}^c} \cdot e^{\frac{(E_C - E_D)}{kT}} \sim E_D$$

La soluzione di stato fondo sarà:

$$N_{D,C} \approx 2N_D \left(1 + \sqrt{1 + 4 \frac{N_D}{N_{eff}} e^{\frac{E_C - E_F}{kT}}} \right)^{-1}$$

Da questa soluzione, racchiudendo tutti i possibili casi, poniamo studiare un semiconduttore dividendo in tre fondamentali casi, con la variazione della temperatura T .

1) Per basse temperature, $4 \frac{N_D}{N_{eff}} e^{\frac{E_C - E_F}{kT}} \gg 1$, $N_{D,C} \approx \sqrt{N_D N_{eff}} e^{-\frac{E_C - E_F}{kT}}$

Questo è detto "regime di congelamento": gran parte dei portatori di carica rimane attaccata agli atomi donatori, e non si verifica grande conduttorità.

2) Per medie temperature, $4 \frac{N_D}{N_{eff}} e^{\frac{E_C - E_F}{kT}} \ll 1$, $N_{D,C} \propto N_D = \text{costante}$

Questo è detto "regime di saturazione": la densità dei portatori è costante, e dipende dal livello donor.

3) Per alte temperature, gli elettroni eccitati termicamente prendono il sopravvento. Gli elettroni già presenti in banda di valenze transiscono, e abbiano così un effetto indipendente dal dragaggio: il semiconduttore ha un regime instabile.

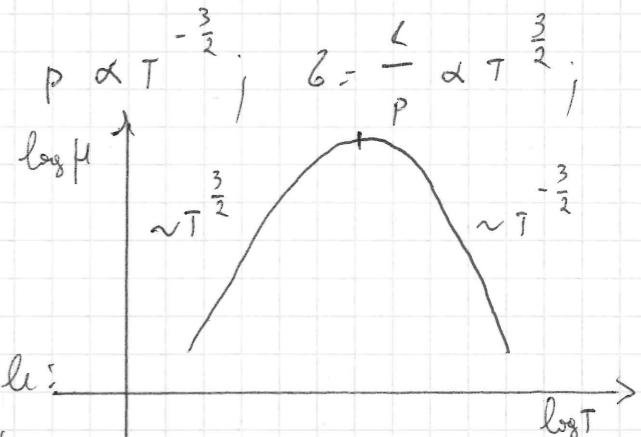
$$N_{D,C} = N_{eff}^C e^{-\frac{(E_C - E_F)}{kT}} = N_{eff}^C e^{-\frac{E_F}{2kT}}$$

~~X~~ Il livello di Fermi, varia, qualitativamente, in questo modo: per alte temperature, sta a metà tra le bande; per medie temperature, si

alza; contemporaneamente, il livello donor andrà a sovrapporsi alla banda di valenze (si dice "degenerazione").

Per T alte, dunque, $\mu \approx T^{-\frac{3}{2}}$.

Per T medie, $L \vec{v} > \alpha \sqrt{T}$; $p \propto T^{-\frac{3}{2}}$; $\mu \propto T^{-\frac{3}{2}}$; $\mu \approx T^{-\frac{3}{2}}$.



Abbiamo sempre qualche dubbio:

A sinistra, a causa di effetti del dragaggio,

abbiamo interazioni elettrostatiche, e μ va come $T^{\frac{3}{2}}$; a destra, prevalgono gli effetti di agitazione termica, "di scattering", e μ va come $T^{-\frac{3}{2}}$, per effetti frattici.

$\mu \approx \frac{L}{m^{\frac{1}{2}}}$; ma ciò non è vero, quando abbiamo campi elettrici \vec{E} molto alti: vediamo

È dovrebbe regolare la velocità dei portatori, come $\vec{v} = \mu \cdot \vec{E}$. Ad una certa velocità, però, l'elettrone raggiunge una velocità simile a quella dei frattici, e inizia ad emettere frattici, e a generare un'onda elastica.

Per il principio di conservazione d'energia, dunque, perde una parte della propria velocità. Questi frattici vengono detti "frattici oltrà", perché si raggiungono immediatamente fermi nel sistema.

Per $\vec{v} \approx 10^7 \text{ cm/s}$, la velocità raggiunge un livello di saturazione.

Per questo motivo, lavorare a alte frequenze può essere un problema.

Questo effetto è utilizzato in alcuni dispositivi.

La conduttorità si ottiene come prodotto di N e μ :

$$\sigma = N_e c \cdot M_p \cdot e$$

Dato il prodotto della densità di portatori, e della loro mobilità, abbiamo la conducibilità dell'incisore.

Metodi sperimentali per misurare la resistenza di un semiconduttore

Abbiamo già parlato ~~delle determinazioni della conducibilità~~, almeno in modo teorico, della conducibilità di un semiconduttore. Vediamo ora dei metodi ottimali per misurare la resistenza di un semiconduttore.

Un semiconduttore può avere diversi spessori: esso potrebbe anche essere di pochi micron. Dato un film di silicio così sottile, possiamo fare alcune considerazioni: il diametro del film può variare da qualche pollice a qualche decina di pollici. Il metodo classico di misurare una resistenza, è quello "delle due punti": un elettrometro irradia corrente nel semiconduttore, e con la legge di Ohm, $R = \frac{V}{i}$.

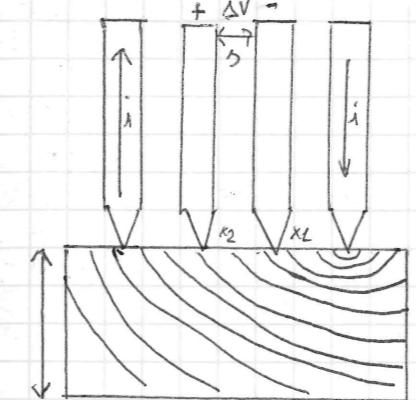
Di fatto questo metodo è estremamente impreciso: faremo considerare, in R , non solo la resistenza dell'semiconduttore, ma anche quella dei puntali, quella del contatto metallo-semiconduttore, una "spread resistance", in caso di semiconduttori non omogenei (che provocherebbe un campo elettrico anisotropico nel semiconduttore), e infine, la resistenza del semiconduttore (unico parametro che ci interessa).

$$R = 2R_p + 2R_c + 2R_{sp} + R_s$$

$$\left\{ \begin{array}{l} R_p = \text{resistenza puntale } x_2 \\ R_c = \text{resistenza contatto } x_2 \\ R_{sp} = \text{spread resistance } x_2 \\ R_s = \text{resistenza del semiconduttore} \end{array} \right.$$

Esiste un metodo in grado di aggredire questo problema.

Il metodo delle quattro punti: prendiamo 4 puntali, tendenzialmente in linea. I due puntali più esterni avranno il solo compito di iniettare nel semiconduttore una corrente nota. I puntali più interni, misureranno la differenza di potenziale. Studiamo però la geometria di questo sistema: non sarà così semplice: prendiamo 4 punti equidistanti:



$$\Delta R = S \left(\frac{dx}{S} \right) \quad i \quad R = \int_{x_1}^{x_2} S \frac{dx}{2\pi x^2} \cdot \left[\frac{1}{2\pi} \cdot \left(-\frac{1}{x} \right) \right]_{x_1}^{x_2} = \frac{L}{2S} \frac{S}{2\pi} = \frac{L}{4\pi S}$$

$$R = \frac{V}{2i} \quad S = 2\pi S \left(\frac{V}{i} \right)$$

Abbiamo fatto queste considerazioni considerando sferica la propagazione di i , perché avevamo uno spessore t non trascurabile.

Se consideriamo un film sottile, le correnti si distribuiranno come "sui tagliati", ossia sulla superficie laterale di cilindri. $S = 2\pi xt$

$$R = \int_{x_1}^{x_2} S \frac{dx}{2\pi xt} = \int_S^{2S} \frac{S}{2\pi t} \frac{dx}{x} = \frac{S}{2\pi t} \ln(x) \Big|_S^{2S} = \frac{S}{2\pi t} \ln 2$$

$$R = \frac{V}{2i} \quad S = \frac{\pi t}{\ln 2} \left(\frac{V}{i} \right)$$

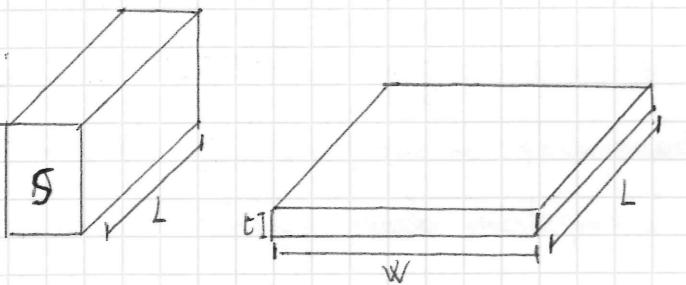
Eseguito un teorema più generale, il "teorema di Van der Pol", do meglio interpretata e generalizzata questo risultato. Sarà ora utile, per poter terminare questo discorso, introdurre una grandezza;

Sheet Resistance - Resistenza strato

Per strati sottili, si definisce "resistenza strato" il rapporto

$$R_s = \frac{S}{E} = \frac{\pi V}{\ln 2 i} \cdot \left[\frac{W}{\square} \right]$$

Dimensionalmente, è in Ω ; la definizione, però, è la seguente: "La resistenza di un film sottile avrebbe se connesso la superficie vista dall'alto di un quadrato di lato arbitrario".



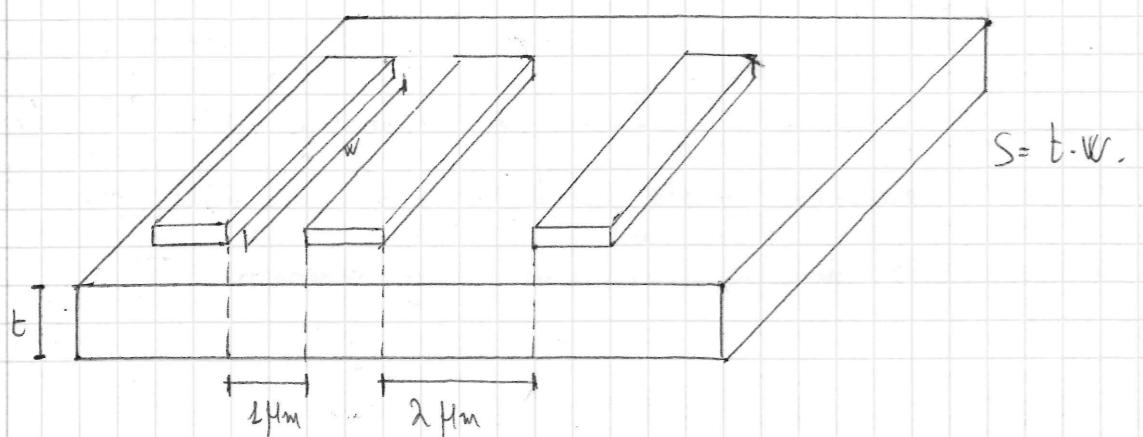
$$R = S \frac{L}{S} = S \frac{L}{WE}$$

$$R = \frac{S L}{E W} = R_s \frac{L}{W}$$

E però il doppaggio non è uniforme, la resistenza si complica notevolmente.

Transmission line model

Altra configurazione molto interessante è la seguente: usare un metallo due punti, ma separando, con un semiconduttore, la resistenza del contatto e quella del semiconduttore. Dovremo dunque un metallo su un semiconduttore, introducendo un contatto finto. Distanziamo i contatti con una distanza t , ad esempio di $1 \mu m$.



Si verifica che le resistenze crescano linearmente con la distanza tra i contatti.

Allora dobbiamo metodologie per determinare la resistenza; vogliamo ora studiare metodi per misurare l'energy gap, la conduttilità, la mobilità elettronica.

Averemo dunque che

$$\sigma = e(n\mu_n + p\mu_h) = e(\mu_n N_c e^{-\frac{E_C - E_F}{kT}} + \mu_h N_v e^{-\frac{E_F - E_V}{kT}}).$$

Consideriamo un semiconduttore insieme.

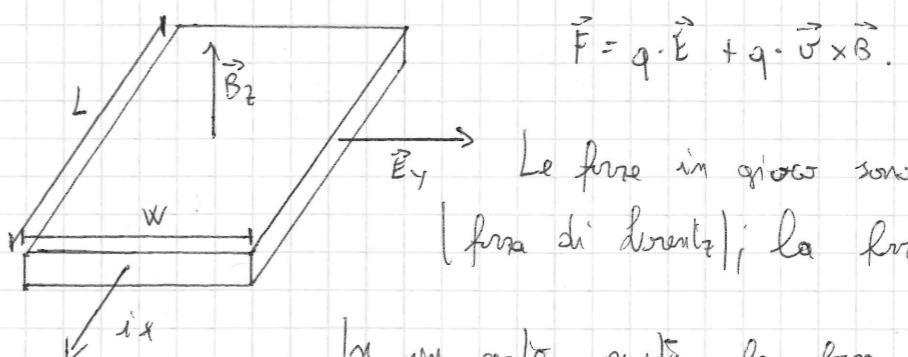
$$E_F = \frac{E_C + E_V}{2}$$

$$(E_C - E_F) = (E_F - E_V). \text{ Quindi,}$$

$$J = J_0 e^{-\frac{E_F}{kT}} ; J_0 = q(\mu_n N_c + \mu_h N_v)$$

Ci servono dunque in sostanza due grandezze: lo " μ " e gli " N ".

Per poterli misurare, è possibile utilizzare un particolare effetto: l'effetto Hall; il metodo si chiama "Misura Hall".



$$\vec{F} = q \cdot \vec{E} + q \cdot \vec{v} \times \vec{B}$$

Le forze in gioco sono quella magnetica (forza di Lorentz); la forza elettrica; in un certo punto, la forza di E è quella magnetica. Si \vec{B} arriveranno ad un punto di equilibrio, e arriverà ad un punto di saturazione. Quando la forza magnetica egualerà in modulo quella elettrica, la carica non verrà più deflessa, e ΔV sarà misurabile.

$$\Delta V = \vec{E}_H \cdot \vec{W}$$

Si dice che si genera un "campo elettrico Hall", che bilancia la forza del campo elettrico \vec{E}_H che sforza la \vec{j} .

$$J = q \cdot g \cdot \vec{v}_d \cdot S \quad \vec{j} = q \cdot g \cdot \vec{v}_d \quad g: \text{densità di carica}$$

$$|F_{\text{elettrico}}| = |F_{\text{magnetico}}| \Rightarrow e \cdot E_H = q \cdot (\vec{v} \times \vec{B}) \quad ; \quad \text{ha } \vec{v} \perp \vec{B} \quad |\vec{v} \times \vec{B}| = |vB|$$

$$E_H = \frac{q v_d B}{e} \quad \vec{v}_d = \frac{\vec{J}_x}{g \cdot S} \quad E_H = \frac{\vec{J}_x B_z}{q \cdot S} = R_H \cdot J_x \cdot S_z$$

$$R_H = \frac{1}{qP} \quad P = \frac{1}{nq}$$

PROBLEMA
TIPO P

PROBLEMA
TIPO N.

Arei bisogni sulla resistività del sistema. Dobbiamo quindi calcolare il numero R_H , la resistenza R del semiconduttore, e poi vediamo che

$$R = \frac{l}{S} \Rightarrow \rho = \frac{R \cdot W}{l} = \frac{V_x}{i_x} \cdot \frac{l}{W} = \frac{R_H}{i_x} \cdot \frac{l}{W}$$

$$\rho = \frac{l}{S} = q \cdot P \cdot H_P \quad H_P = \frac{R_H}{S}$$

In realtà, quella che misuriamo, è la cosiddetta "mobilità Hall", perché i \vec{B} modificano i meccanismi di scattering.

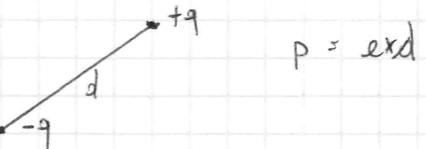
$$\mu_H = 2 \mu \cdot 2 \pi l \quad \text{PER APPROXIMAZIONE.}$$

Ci siamo fin qui preoccupati delle proprietà elettriche dei semiconduttori. Ora ci preoccupiamo di quelle ottiche.

Proprietà ottiche dei semiconduttori

Teoria semiempirica.

Possiamo considerare semplicemente le interazioni tra un campo elettromagnetico e il semiconduttore. Il materiale si può modellare come un insieme di poli, dipoli per l'esatta. Già, influenzando un lontananza della carica positiva, e uno della carica negativa. Ogni polo ha un momento di dipolo:



Consideriamo un campo elettromagnetico che si propaga in modo armato:

$$\begin{cases} E_x(z,t) = E_0 e^{i(k_0 z - \omega t)} \\ B_x(z,t) = B_0 e^{i(k_0 z - \omega t)} \end{cases}$$

Consideriamo per comodità solo il campo elettrico $E(t)$: per B , le propagazioni sono uguali.

$$E(t) = E_0 e^{i\omega t}$$

Se $E(t)$ scatta, allora anche il nostro polo scatta, e anch'esso con pulsazione ω . Tale interazione, indurrà un momento di dipolo, e il generatore di campi elettromagnetici, di frequenza $\frac{\omega}{2\pi} = V$.

L'onda elettromagnetica sarà una lunghezza d'onda λ . Quando l'onda invade il materiale, vi si propaga più lentamente con una $\lambda \neq \lambda_0$, e così minore. Parte dell'energia, dunque, viene assorbita dal materiale.

Definiamo un "indice di rifrazione" $n = \frac{c}{v}$. $n \leq 1$.

$$v = \frac{\lambda}{\sqrt{\epsilon_0 \epsilon_2 \mu_0}} \quad ; \quad c = \frac{\lambda}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}} \quad ; \quad n = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_2 \mu_2}} \cdot v = \frac{\lambda}{T} = \lambda \cdot V = \frac{\lambda \omega}{2\pi}$$

Da tutto ciò,
 $\lambda = \frac{\chi_0}{m}$.

Quando l'onda colpisce il solido, esistono tre differenti forze:

- Una forza elettrica
- Una forza di richiamo nucleo-elettro
- Una forza dissipativa.

$$m \cdot a = e \vec{E} + \vec{F}_{\text{elastico}} + \vec{F}_{\text{dissipativo}} \Rightarrow m \cdot a = m \frac{d^2 \vec{x}}{dt^2}$$

$$\vec{F}_{\text{elastico}} = -k \vec{x}$$

$$\vec{F}_{\text{dissipativo}} = -\gamma \frac{d\vec{x}}{dt}$$

$$\Rightarrow m \frac{d^2 \vec{x}}{dt^2} + \gamma \frac{d\vec{x}}{dt} + k\vec{x} - e E_x(t) = e \cdot E_0 e^{-i\omega t}.$$

Risolvendo tale equazione differenziale, si trova:

$$\frac{e E_0}{m \left(\frac{k}{m} - \omega^2 \right) - i\gamma\omega} = \frac{e E_0}{m(\omega_s^2 - \omega^2) - i\gamma\omega}$$

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

Ricordiamo, da Zinco II, la definizione di polarizzatore: era ϵ_0 il "momento di doppio per unità di volume".

$$P = N_e \epsilon_0(t) \cdot \epsilon_0 \chi E(t) = \epsilon_0 (\epsilon_2 - 1) E(t);$$

$$\text{Pondé } \epsilon_2 \gg \mu_2, \quad \epsilon_2 = 1 + \chi \approx n^2.$$

$$\Rightarrow P = \frac{\epsilon_0}{N_e \epsilon_0^2} (\epsilon_2 - 1) E(t).$$

$$n^2 = \frac{\epsilon_0}{m(\omega_s^2 - \omega^2) - i\gamma\omega} + 1 = \frac{i\epsilon_2}{\epsilon_1 + \epsilon_2}$$

Abbiamo sostituito le espressioni di $E(t)$ e $\epsilon_2(t)$.

Abbiamo cioè scomposto n^2 in parte reale e parte immaginaria.

$$n = \sqrt{n^2} = n_R + i n_I.$$

✓ Onda sona del tipo
 $E(z, t) = E_0 e^{i(k_0 z - \omega t)}$

E_0 è TERMINE DI SHORZAMENTO $E_0 e^{-i(k_0 z - \omega t)}$ è UNA PROPAGANTE

Nel materiale, la propagazione dell'onda sarà confrontabile ad un salotto armonico smorzato.

Terminato questo modello semiclassico, passiamo ad un formalismo quantistico.

Descrizione quantistica dell'interazione onda elettromagnetica - semiconduttore.

L'onda elettromagnetica è, di fatto, un flusso di fotoni; perciò dunque onda-corsa. Parte dei fotoni sarà assorbita, parte ne passerà nel solido.

$$E_f = h\omega; \quad p_f = \hbar k_f.$$

Possiamo descrivere quantisticamente, l'interazione o tra fotoni ed elettroni, o tra fotoni e nuclei (e quindi, fotoni-foton). Esistono anche descrizioni più complesse.

Ricordiamo gli elettroni:

$$E_e = E(\vec{k}_e); \quad p_e = \hbar \vec{k}_e \quad (\text{descrizione mediante vettore d'onda } \vec{k}).$$

$$E'_e = E_f + E_e \quad (E'_e \text{ è l'energia dell'elettrone post-interazione}).$$

$$p_f + p_e = p'_e \Rightarrow \vec{k}_f + \vec{k}_e = \vec{k}'_e.$$

$$\text{Ma } \vec{k}_f \perp \vec{k}_e.$$

$$p_f = \hbar \vec{k}_f = \frac{E}{c}, \quad k_f = \frac{E}{ct} = \frac{h\nu}{ct} = \frac{V}{C2\pi} \quad (\text{Va da } 10^4 \text{ m}^{-2} \text{ a } 10^2 \text{ m}^{-2}).$$

$$\text{Per gli elettroni, } k_e \approx \frac{\pi}{a} \rightarrow 10^{10} \text{ m}^{-2} \text{ a } \approx 92 \text{ nm}.$$

Vi è un fenomeno di assorbimento energetico, ma \vec{E} è un vettore praticamente costante: $\vec{E} \sim \vec{N_E}$.

Dalšíamo, col vettore di Poynting, l'energia del campo eletromagnetico:

$$I = \frac{P}{S} = \frac{\vec{E}}{b \cdot S} \quad E(t) \propto c \cdot B(t)$$

$$I \propto c^2.$$

Se dunque \vec{E} è smorzato esponenzialmente, lo sarà anche I :

$$I(z) = I_0 e^{-dz}, \quad d = \text{coefficiente di assorbimento}$$

(Legge di Lambert-Beer)

Una percentuale sempre maggiore di fotoni viene assorbita: essi vengono convertiti o in energia, o in formi; vediamo meglio.

L'energia può uscire sotto forma di nuovi fotoni, e quindi avere una "ricombinazione radiativa"; o sotto forma di formi, producendo energia termica (ricombinazione non radiativa).

Come prende la ricombinazione radiativa o no, dipende dal meccanismo investito dal fascio di fotoni.

Come si può calcolare d : partendo dalla definizione, $d = 2k n_i$.

n_i indica la quantità di fotoni persi in una certa posizione \vec{N}_E .

$$n(z) = \frac{1}{\hbar \omega} N_0 e^{-dz} \Rightarrow dn(z) = -2 N_0 e^{-dz} dz = -d n(z)/dz.$$

Ad una certa posizione d'onda, il numero di fotoni si ingrossa di d .