



UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI NAPOLI
FEDERICO II
Corsi di Laurea Magistrale in Geofisica e Geofisica Applicata e Matematica

Dispense del corso di Complementi di fisica

Dott. Fabio Garufi

Indice

1	Elettrostatica e conduzione	3
1.1	Richiami di elettrostatica nel vuoto	3
1.1.1	Il Campo Elettrico	3
1.1.2	Teorema di Gauss	4
1.1.3	Potenziale scalare	4
1.1.4	Distribuzione superficiale di carica e doppio strato	5
1.1.5	Equazione di Poisson ed energia del campo	6
1.2	Dielettrici	7
1.2.1	Costante dielettrica relativa	7
1.2.2	Il vettore induzione elettrica	7
1.2.3	Energia del campo nei dielettrici	9
1.2.4	Polarizzazione per deformazione ed orientamento	9
1.2.5	Passaggio fra due dielettrici	12
1.2.6	Dielettrici in presenza di campi variabili nel tempo	13
1.2.7	Teorie di campo medio	16
1.3	Conduzione elettrica	16
1.3.1	Elementi della teoria di Drude	17
1.3.2	Lavoro meccanico della corrente e legge di Joule	17
1.3.3	Correnti di origine termica	18
1.3.4	Conduzione nei materiali semiconduttori	19

Capitolo 1

Elettrostatica e conduzione

1.1 Richiami di elettrostatica nel vuoto

1.1.1 Il Campo Elettrico

Definiamo il campo elettrico $\mathbf{E}$ a partire dalla forza che subisce una carica elettrica nello spazio, in presenza di un'altra carica. Per una carica di prova unitaria, possiamo scrivere:

$$\mathbf{F} = q\mathbf{E} \quad (1.1)$$

Analogamente, possiamo scrivere la legge (di Coulomb) per due cariche q_1 e q_2 . La forza esercitata dalla carica 1 sulla 2 sarà:

$$\mathbf{F}_{12} = kq_1q_2 \frac{\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2}{|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|^3} \quad (1.2)$$

Dal confronto fra le (1.1) e (1.2) si ricava che il campo elettrico generato dalla carica q_1 nel punto $\mathbf{x}$ è:

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}) = kq_1 \frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}_1}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}_1|^3} \quad (1.3)$$

in cui la costante di proporzionalità k vale:

$$k = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} = 10^{-7}c^2 \text{ (SI)}$$

avendo introdotto la *permittività* o *costante dielettrica* del vuoto che vale $\epsilon_0 = 8.854 \times 10^{-12} Fm^{-1} = 8.854 \times 10^{-12} C^2 N^{-1} m^{-2}$. Le dimensioni del campo elettrico saranno: $[E] = Vm^{-1}$.

Per avere un'idea della forza del campo elettrico rispetto a quello gravitazionale, consideriamo il rapporto tra la forza elettrica e gravitazionale esercitata da un elettrone su un'altro elettrone:

$$F_E = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2}$$
$$F_g = G \frac{m_e^2}{r^2}$$

ove $G = 6.67 \times 10^{-11} \text{ Nm}^2 \text{ kg}^{-2}$, $e = 1.602 \times 10^{-19} \text{ C}$, $e/m_e = 1.759 \times 10^{11} \text{ C kg}^{-1}$.
Dunque:

$$\frac{F_E}{F_g} = \frac{1}{4\pi G \epsilon_0} \frac{e^2}{m_e^2} = 4.17 \times 10^{42} \quad (1.4)$$

1.1.2 Teorema di Gauss

Consideriamo una superficie chiusa S ed una carica ad una distanza r da un punto della superficie. Il flusso del campo attraverso la superficie è:

$$\begin{aligned} \int_S \mathbf{E} \cdot \mathbf{n} dS &= \int_S \frac{1}{4\pi\epsilon_0} q \frac{r \cos(\theta)}{r^3} dS \\ &= \frac{1}{4\pi\epsilon_0} q \int r \frac{1}{r^3} r^2 d\Omega = \frac{q}{\epsilon_0} \end{aligned} \quad (1.5)$$

dunque, per una densità di carica $\rho(x)$:

$$\int_S \mathbf{E} \cdot \mathbf{n} dS = \frac{1}{\epsilon_0} \int_V \rho(\mathbf{x}) d^3x = \int_V \nabla \cdot \mathbf{E} d^3x \quad (1.6)$$

da cui si ricava la formula differenziale del *Teorema di Gauss*:

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0} \quad (1.7)$$

1.1.3 Potenziale scalare

La legge di Coulomb (1.3), per una densità di carica $\rho(\mathbf{x})$, la possiamo scrivere:

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int \rho(\mathbf{x}') \frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^3} d^3x' \quad (1.8)$$

La funzione integranda può essere scritta come il gradiente rispetto a x di $-1/|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|$. Infatti:

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\mathbf{x}} \left(\frac{1}{\sqrt{\mathbf{x}^2 + \mathbf{x}'^2 - 2\mathbf{x} \cdot \mathbf{x}'}} \right) &= \\ &= - \frac{(2\mathbf{x}' - 2\mathbf{x})}{2(\mathbf{x}^2 + \mathbf{x}'^2 - 2\mathbf{x} \cdot \mathbf{x}')^{3/2}} \\ &= - \frac{\mathbf{x}' - \mathbf{x}}{|\mathbf{x}' - \mathbf{x}|^3} \end{aligned}$$

Dunque la (1.8) diventa:

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}) = - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \nabla \int \frac{\rho(\mathbf{x}')}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} d^3x' = -\nabla V \quad (1.9)$$

ove si è definito il potenziale elettrico:

$$V(\mathbf{x}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{\rho(\mathbf{x}')}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} d^3x' \quad (1.10)$$

Se il campo è il gradiente di un potenziale scalare V , allora il rotore del campo è nullo:

$$\nabla \times \mathbf{E} = 0 \quad (1.11)$$

e di conseguenza è nulla la circuitazione del campo lungo una linea chiusa:

$$\oint \mathbf{E} \cdot d\boldsymbol{\ell} = 0 \quad (1.12)$$

1.1.4 Distribuzione superficiale di carica e doppio strato

Il teorema di Gauss applicato ad una superficie carica con una densità superficiale σ si può scrivere come:

$$\int_S \mathbf{E} \cdot \mathbf{n} dS = \frac{1}{\epsilon_0} \int_S \sigma dS \quad (1.13)$$

Se consideriamo i campi dai due lati della superficie E_1 ed E_2 , risulta $(\mathbf{E}_1 - \mathbf{E}_2) \cdot \mathbf{n} = \sigma/\epsilon_0$, che ci dice solo che c'è una discontinuità nelle componenti normali del campo dai due lati della superficie. D'altra parte, la (1.12) applicata ad un circuito che attraversi la superficie e abbia due lati uguali e paralleli alla superficie ℓ_1 ed ℓ_2 , e gli altri due ortogonali, implica che:

$$\oint \mathbf{E} \cdot d\boldsymbol{\ell} = \mathbf{E}_1 \cdot \ell_1 - \mathbf{E}_2 \cdot \ell_2 = 0 \quad (1.14)$$

essendo i due lati paralleli percorsi in senso opposto.

In definitiva, mentre le componente normale alla superficie subisce un salto σ/ϵ_0 , la componente tangenziale si conserva nel passaggio attraverso la superficie.

Consideriamo ora due superfici cariche con carica opposta, poste a distanza $d(x)$ fra loro (Fig.1.1 - strato di dipolo). Il potenziale elettrico in un punto $O(\mathbf{x})$ è dato dalla somma dei potenziali elettrici dei due strati calcolati in quel punto.

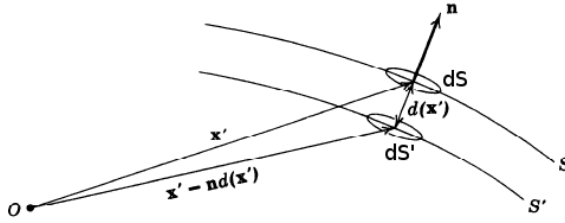


Figura 1.1: Definizione delle variabili per il calcolo del potenziale elettrico dello strato di dipolo

$$V(\mathbf{x}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left[\int_S \frac{\sigma(\mathbf{x}')}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} dS + \int_{S'} \frac{-\sigma(\mathbf{x}')}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}' + d\mathbf{n}|} dS' \right] \quad (1.15)$$

Siccome $d \ll |\mathbf{x}'|$, possiamo sviluppare il secondo termine in serie di Taylor:

$$\frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}' + d\mathbf{n}|} \simeq \frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} + d\mathbf{n} \cdot \nabla \left(\frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \right)$$

Dunque, sostituendo in (1.15), otteniamo:

$$V(\mathbf{x}) \simeq \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int_S \sigma(\mathbf{x}') d\mathbf{n} \cdot \nabla' \left(\frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \right) dS' \quad (1.16)$$

avendo tenuto conto che $\nabla = -\nabla'$. Definendo il *dipolo elettrico* come

$$\mathbf{p}(\mathbf{x}) = \sigma(x) d\mathbf{n} dS \quad (1.17)$$

risulta che il potenziale di doppio strato, o di dipolo, è:

$$V(x) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{\mathbf{p} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^3} \quad (1.18)$$

1.1.5 Equazione di Poisson ed energia del campo

Riassumendo i risultati dei paragrafi precedenti, possiamo scrivere:

$$\begin{cases} \nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0} \\ \nabla \times \mathbf{E} = 0 \\ \mathbf{E} = -\nabla V \end{cases} \quad (1.19)$$

Dalla prima e dalla terza, otteniamo:

$$\nabla \cdot \nabla V \equiv \nabla^2 V = -\frac{\rho}{\epsilon_0} \quad (1.20)$$

che è l'equazione di Poisson, caso disomogeneo dell'equazione di Laplace.

Consideriamo, ora, il potenziale generato da una distribuzione di $n - 1$ cariche:

$$V(x_i) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{j=1}^{n-1} \frac{q_j}{|x_i - x_j|}$$

L'energia potenziale totale sarà:

$$\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n q_i V(x_i) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^{n-1} \frac{q_i q_j}{|x_i - x_j|}$$

In definitiva, passando dal discreto al continuo, l'energia di una distribuzione uniforme di cariche è:

$$W = \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \int \rho(x) \left[\int \frac{\rho(x')}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} d^3x' \right] d^3x = \frac{1}{2} \int \rho(x) V(x) d^3x$$

Usando l'equazione di Poisson, $\rho(x) = -\epsilon_0 \nabla^2 V(x)$, dunque:

$$W = -\frac{\epsilon_0}{2} \int V \nabla^2 V d^3x$$

che, integrata per parti dà:

$$W = -\frac{\epsilon_0}{2} \left[V \nabla^2 V - \int \nabla V \cdot \nabla V d^3x \right]$$

Il primo addendo si annulla all'infinito, e dunque

$$W = \frac{\epsilon_0}{2} \int |\mathbf{E}(\mathbf{x})|^2 d^3x \quad (1.21)$$

1.2 Dielettrici

1.2.1 Costante dielettrica relativa

Consideriamo, ora, dei materiali in cui le cariche elettriche, localizzate negli atomi e nelle molecole, siano macroscopicamente statiche, ovvero non ci siano flussi di materia e di carica lungo di essi. Questi materiali, di conseguenza, non condurranno cariche elettriche e saranno dunque degli isolanti elettrici. Se pensiamo questi materiali come delle distribuzioni uniformi di cariche, potremo scrivere:

$$V(x) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{\rho(\mathbf{x}')}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} d^3x'$$

Detto $\mathbf{r} = \mathbf{x} - \mathbf{x}'$ e sviluppando in serie di Taylor attorno a r^{-1} , otteniamo:

$$V(x) \simeq \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left[\frac{q}{r} + \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}}{r^3} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{Q_{ij} x_i x_j}{r^5} \right] \quad (1.22)$$

Dalla 1.22, notiamo che per questi materiali – i dielettrici – valgono le stesse leggi che per il vuoto, con una correzione che, macroscopicamente si può pensare come una diversa costante dielettrica. Detto, dunque, E_0 il campo nel vuoto, per i dielettrici varrà:

$$E = \frac{1}{\epsilon_r} E_0$$

in cui ϵ_r è la costante dielettrica relativa del mezzo (che è adimensionale).

Siccome per una superficie carica nel vuoto vale:

$$E_0 = \frac{\sigma}{\epsilon_0}$$

allora, per una superficie in un dielettrico:

$$E = \frac{\sigma}{\epsilon_0 \epsilon_r}$$

Si può pensare, che nel materiale esista un campo macroscopico dovuto alla struttura interna, che generi una densità di cariche (di polarizzazione) σ' tale che:

$$E = \frac{1}{\epsilon_0} (\sigma - \sigma') = \frac{\sigma}{\epsilon_0 \epsilon_r}$$

dunque

$$\sigma' = \frac{\epsilon_r - 1}{\epsilon_r} \sigma \quad (1.23)$$

che mostra che la densità di cariche di polarizzazione è proporzionale alla densità delle cariche che generano il campo.

1.2.2 Il vettore induzione elettrica

D'altra parte, possiamo costruire il potenziale macroscopico come la sovrapposizione dei potenziali generati da volumi piccoli (ma ancora non abbastanza

da dover considerare la struttura microscopica del materiale). Dai primi due termini della 1.22:

$$\Delta V(x, x') = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left[\frac{\rho(\mathbf{x}')}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} + \frac{\mathbf{P} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^3} \right]$$

possiamo scrivere:

$$V(\mathbf{x}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int \left[\frac{\rho(\mathbf{x}')}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} + \mathbf{P}(\mathbf{x}') \cdot \nabla' \left(\frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \right) \right] d^3x' \quad (1.24)$$

Integrando per parti il II addendo e considerando che $r^{-1} \rightarrow 0$ all'infinito, otteniamo:

$$V(x) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{[\rho(\mathbf{x}') - \nabla' \cdot \mathbf{P}(\mathbf{x}')] }{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} d^3x' \quad (1.25)$$

Che è l'espressione del potenziale statico con una densità di carica $\rho - \nabla \cdot \mathbf{P}$. Usando questa densità nella prima equazione di Maxwell:

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho_{eff}}{\epsilon_0} = \frac{\rho - \nabla \cdot \mathbf{P}}{\epsilon_0}$$

posiamo scrivere:

$$\nabla \cdot (\epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}) \equiv \nabla \cdot \mathbf{D} = \rho \quad (1.26)$$

che definisce il vettore induzione elettrica o spostamento elettrico $\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}$.

Se consideriamo un mezzo isotropo, allora $\mathbf{P}$ è parallelo al campo $\mathbf{E}$, si potrà dunque scrivere una relazione di proporzionalità fra i due vettori, mediante un coefficiente indipendente dalla direzione:

$$\mathbf{P} = \epsilon_0 \chi \mathbf{E} \quad (1.27)$$

ove χ è la *suscettività dielettrica*, del materiale. Dunque:

$$\mathbf{D} = \epsilon_0(1 + \chi)\mathbf{E} = \epsilon \mathbf{E}$$

che definisce la *permittività elettrica* del materiale: $\epsilon = \epsilon_0(1 + \chi) = \epsilon_0\epsilon_r$. Se il mezzo non è uniforme, la densità di cariche di volume $\bar{\rho} = -\nabla \cdot \mathbf{P}$ sarà diversa da 0, dunque:

$$\bar{\rho} = -\epsilon_0 \nabla \cdot (\epsilon_r - 1)\mathbf{E} = -\nabla \cdot \frac{(\epsilon_r - 1)}{\epsilon_r} \mathbf{D} = -\mathbf{D} \cdot \nabla \frac{(\epsilon_r - 1)}{\epsilon_r}$$

Se, invece, il mezzo è isotropo e uniforme:

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho}{\epsilon}$$

e tutte le leggi sono uguali a quelle nel vuoto, salvo che i campi prodotti dalle cariche sono ridotti di un fattore ϵ_0/ϵ . Una immediata conseguenza di ciò è che la capacità di un condensatore riempito con una sostanza dielettrica fra gli elettrodi è maggiore di quella che avrebbe con gli elettrodi separati dal vuoto.

1.2.3 Energia del campo nei dielettrici

Abbiamo visto che l'energia del campo nel vuoto è data da:

$$W = \frac{1}{2} \int \rho(\mathbf{x}) V(\mathbf{x}) d^3x$$

In presenza di un dielettrico, non lo possiamo più dire perché c'è il campo microscopico, e parte dell'energia del campo è utilizzata per polarizzare il mezzo.

Consideriamo la variazione dell'energia δW dovuta ad una variazione $\delta\rho$ della carica macroscopica:

$$\delta W = \int \delta\rho(\mathbf{x}) V(\mathbf{x}) d^3x$$

ma:

$$\begin{aligned} \delta\rho &= \nabla \cdot \delta\mathbf{D} \\ E &= -\nabla V \end{aligned}$$

e dunque

$$\delta W = \int \nabla \cdot \delta\mathbf{D}(\mathbf{x}) V(\mathbf{x}) d^3x$$

che, integrato per parti dà:

$$V(x)\delta\mathbf{D}|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \delta\mathbf{D}(\mathbf{x}) \cdot \nabla V(\mathbf{x}) d^3x$$

Il primo termine si annulla perché il potenziale è nullo all'infinito, e, in definitiva, si ottiene:

$$\delta W = \int_{-\infty}^{\infty} \delta\mathbf{D}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{E}(\mathbf{x}) d^3x \quad (1.28)$$

Se il mezzo è lineare, allora possiamo scrivere:

$$\delta\mathbf{D} \cdot \mathbf{E} = \frac{1}{2} \delta(\mathbf{D} \cdot \mathbf{E})$$

e dunque dire che l'energia del campo in presenza di un dielettrico sarà:

$$W = \frac{1}{2} \int \mathbf{D}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{E}(\mathbf{x}) d^3x \quad (1.29)$$

1.2.4 Polarizzazione per deformazione ed orientamento

Vediamo, ora quali sono i meccanismi che possono portare alla polarizzazione di un mezzo.

Se schematizziamo gli atomi con il modello planetario di Bohr, con un nucleo positivo al centro e gli elettroni, negativi all'esterno, l'applicazione di un campo elettrico, sposterà il nucleo in una direzione e gli elettroni in quella opposta, dando così luogo ad un dipolo elettrico. Questo meccanismo è la polarizzazione per deformazione.

A livello molecolare, è possibile che le molecole abbiano un momento elettrico proprio. Ad esempio, la molecola del cloruro di sodio, è formata da uno ione cloro, positivo, legato ad uno ione sodio, negativo. In presenza del campo, queste molecole tenderanno ad orientarsi in media nella direzione del campo, con delle fluttuazioni dovute all'agitazione termica. Questa è la polarizzazione per orientamento.

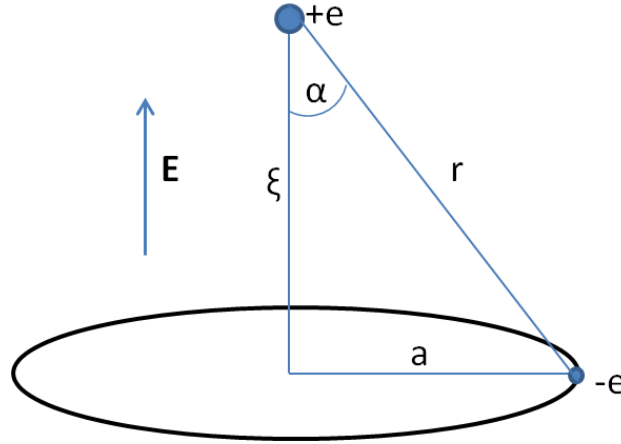


Figura 1.2: Effetto di un campo elettrico su un atomo di idrogeno nel modello di Bohr

Deformazione dell'atomo di idrogeno

Come esempio quantitativo di polarizzazione per deformazione consideriamo l'atomo di idrogeno nel modello di Bohr, in un campo elettrico come mostrato in Fig.1.2.4. Per effetto del campo il nucleo ed il centro dell'orbita dell'elettrone si separeranno di una distanza ξ , di conseguenza, la distanza tra il nucleo di carica $+e$ e l'elettrone di carica $-e$ sarà: $r = \sqrt{\xi^2 + a^2}$, essendo a il raggio dell'orbita. All'equilibrio dovremo eguagliare la forza attrattiva fra elettrone e nucleo (proiettata nella direzione del campo), con quella del campo, che tende a separarli:

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2} \frac{\mathbf{r}}{r} \cos(\alpha) = e\mathbf{E}$$

Per $\xi \ll a$ sarà: $r \simeq a$, inoltre $\cos(\alpha) = \xi/r \simeq \xi/a$, dunque:

$$eE = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{a^2} \frac{\xi}{a} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e}{a^3} e\xi$$

dove abbiamo evidenziato il termine $p = e\xi$ che rappresenta il dipolo elettrico indotto dal campo E :

$$\mathbf{p} = 4\pi\epsilon_0 a^3 \mathbf{E} \quad (1.30)$$

Polarizzazione media per orientamento

Come abbiamo detto, per molecole dotate di un proprio momento di dipolo elettrico, la tendenza ad orientarsi in direzione del campo è contrastata dall'agitazione termica che tenderebbe a disporle in maniera casuale. La polarizzazione media di un mezzo composto da molecole polari, si potrà calcolare come media statistica della polarizzazione usando la funzione di distribuzione di Boltzman, che descrive la distribuzione delle energie ad una determinata temperatura T .

L'energia di un dipolo elettrico $\mathbf{p}$ nel campo $\mathbf{E}$, sarà:

$$\mathbf{F} \cdot \mathbf{x} = e\mathbf{E} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{p} \cdot \mathbf{E} = pE \cos \theta$$

essendo θ l'angolo fra il campo e il dipolo. La distribuzione di Boltzman, a meno di costanti moltiplicative (ininfluenti nel calcolo della media) è:

$$f(\cos \theta) = e^{-\frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{E}}{kT}} \quad (1.31)$$

Di conseguenza, il valor medio della polarizzazione sarà:

$$\langle P \rangle = \frac{\int_{-\pi}^{\pi} \cos \theta f(\cos \theta) d\Omega}{\int_{-\pi}^{\pi} f(\cos \theta) d\Omega} \quad (1.32)$$

essendo $d\Omega = \sin \theta d\phi d\theta = d\phi d(\cos \theta)$ l'elemento di angolo solido. Sostituendo a $f(\cos \theta)$ la sua espressione (1.31) ed eseguendo il cambio di variabile $x = \cos \theta$:

$$\langle P \rangle = \frac{\int_{-1}^1 x e^{ax} dx}{\int_{-1}^1 e^{ax} dx}$$

avendo chiamato $a = \frac{Ep}{kT}$. Integrando per parti il numeratore, otteniamo:

$$\frac{\frac{1}{a} [xe^{ax}]_{-1}^1 - \frac{1}{a^2} \int_{-1}^1 e^{ax} dx}{\frac{1}{a} \int_{-1}^1 e^{ax} dx}$$

Eseguendo il calcolo:

$$\langle P \rangle = \text{ctgh}(a) - \frac{1}{a} = L(a) \quad (1.33)$$

La funzione $L(a)$ è la funzione di *Langevin*. Per valori di $KT \gg Ep$ (cioè quasi sempre nell'ambiente, essendo $300K = 0.0025 \text{ eV}/c^2 = 4.14 \cdot 10^{-21} J$), possiamo sviluppare $L(a)$ in serie attorno ad $a = Ep/KT$, e risulta: $L(a) \simeq a/3$, e dunque:

$$\langle \mathbf{P} \rangle = \mathbf{p} L(a) = \frac{p^2 E^*}{3KT}$$

Il dipolo totale sarà dato da $\mathbf{P} = n\langle \mathbf{P} \rangle = n\alpha E^*$, essendo α la polarizzabilità elettrica ed E^* il campo interno. Dobbiamo adesso valutare il campo interno al materiale. Se consideriamo un volume sferico V e raggio R che contenga molte molecole, il campo interno alla sfera generato dalle cariche di polarizzazione si può ricavare dal teorema di Gauss. Infatti il flusso $F_s(E)$ del campo attraverso la superficie è: $F_s(E) = 4\pi r^2 E(r)$ e la carica contenuta nella sfera è $q = 4/3\pi r^3 \rho$. Dunque, per Gauss $F_s(E) = q/\epsilon_0 = \rho r/3\epsilon_0$, possiamo scrivere:

$$E^* = \frac{P}{3\epsilon_0} \quad (1.34)$$

Dunque, il campo interno al materiale, dovuto alle cariche di polarizzazione ed al campo esterno sarà:

$$\mathbf{E}^* = \mathbf{E} + \frac{1}{3\epsilon_0} \mathbf{P}$$

ma, siccome $\mathbf{P} = n\alpha \mathbf{E}^*$, con successivi passaggi, possiamo ricavare l'espressione della polarizzazione elettrica in funzione del solo campo esterno e della polarizzabilità:

$$\mathbf{P} = n\alpha \left(\mathbf{E} + \frac{1}{3\epsilon_0} \mathbf{P} \right)$$

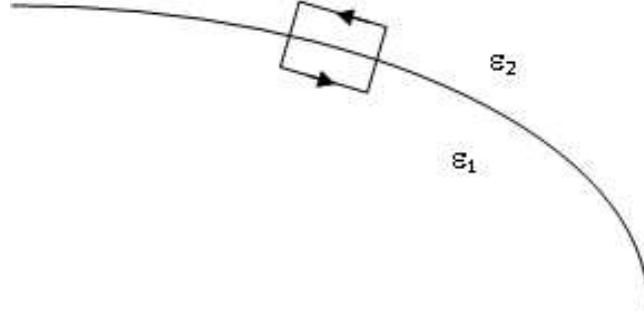


Figura 1.3: Superficie di separazione fra due dielettrici differenti

$$\mathbf{P} = \frac{n\alpha\mathbf{E}}{1 - \frac{n\alpha}{3\epsilon_0}} = \epsilon_0\chi\mathbf{E} \quad (1.35)$$

e di conseguenza, l'espressione della suscettività elettrica in funzione della polarizzabilità:

$$\chi = \frac{n\alpha}{1 - \frac{n\alpha}{3}} \quad (1.36)$$

Relazione di Clausius-Mossotti

Ricaviamo, ora, un'espressione che lega la costante elettrica relativa alla polarizzabilità, che, come vedremo in seguito, è molto utile quando si considerano gli effetti di un campo variabile nel tempo su di un materiale dielettrico.

Partendo dall'Eq.(1.35), e ricordando che $\epsilon = \epsilon_0(1 + \chi) = \epsilon_0\epsilon_r$, ricaviamo:

$$\epsilon = \epsilon_0 \left(\frac{3n\alpha}{3\epsilon_0 - n\alpha} + 1 \right) = \epsilon_0\epsilon_r$$

dunque

$$(\epsilon_r - 1)(3\epsilon_0 - n\alpha) = 3n\alpha$$

ed, infine, raccogliendo a primo membro tutti i termini in $n\alpha$, otteniamo la relazione di Clausius-Mossotti:

$$\frac{n\alpha}{3\epsilon_0} = \frac{\epsilon_r - 1}{\epsilon_r + 2} \quad (1.37)$$

1.2.5 Passaggio fra due dielettrici

Consideriamo due dielettrici adiacenti con costanti dielettriche ϵ_1 ed ϵ_2 come in Fig.1.3. Siccome $\nabla \times \mathbf{E} = 0$, la circuitazione lungo una qualsiasi linea chiusa che passi attraverso i due dielettrici è nulla. In particolare possiamo prendere la linea indicata in Fig. 1.3 e far tendere a zero la lunghezza dei tratti che attraversano la superficie di separazione. Al limite, perché sia rispettata la condizione sul rotore, sarà:

$$E_{t1} = E_{t2}$$

cioé, la componente trasversale del campo elettrico si conserva.

D'altra parte, considerando un cilindretto con le due basi dS nei due dielettrici, siccome questo non contiene cariche, sarà nullo il flusso del campo D , dunque, $\nabla \cdot \mathbf{D} = 0$ e quindi:

$$\int D \cdot \mathbf{n} dS = 0$$

anche qui, facendo tendere a 0 la distanza fra le basi, conterà solo il flusso attraverso le basi, e di conseguenza:

$$D_{n1} = D_{n2} \quad (1.38)$$

Quindi si conserva la componente normale dell'induzione elettrica. Siccome $D = \epsilon E$, la (1.38) diventa $\epsilon_1 E_{n1} = \epsilon_2 E_{n2}$. Dividendo per la componente trasversale del campo elettrico avremo:

$$\epsilon_1 \frac{E_{n1}}{E_{t1}} = \epsilon_2 \frac{E_{n2}}{E_{t2}} = \epsilon_1 E \operatorname{tg} \theta_1 = \epsilon_2 E \operatorname{tg} \theta_2$$

essendo θ_i l'angolo che il campo elettrico ha rispetto alla normale alla superficie dal lato i . Di conseguenza:

$$\frac{\operatorname{tg} \theta_1}{\operatorname{tg} \theta_2} = \frac{\epsilon_2}{\epsilon_1} \quad (1.39)$$

1.2.6 Dielettrici in presenza di campi variabili nel tempo

Per capire il comportamento dei dielettrici sottoposti all'azione di campi variabili nel tempo, dobbiamo considerare dei modelli semplici che ne mimino il comportamento.

Polarizzazione per deformazione: modello a molla

Per quel che riguarda la polarizzabilità per deformazione dell'atomo, useremo un modello dell'atomo di idrogeno, in cui l'elettrone è legato al nucleo da una molla di costante elastica K . Sotto l'effetto di un campo locale E_{loc} l'elettrone si sposterà di x . All'equilibrio:

$$-eE_{loc} = K x = m\omega_0^2 x$$

avendo definito la pulsazione $\omega_0 = \sqrt{\frac{K}{m}}$. L'equazione del moto è:

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} + m\omega_0^2 x = -eE$$

Per un campo variabile nel tempo $E = E_0 e^{i\omega t}$ avremo:

$$m(-\omega^2 + \omega_0^2) x_0 = -e E_0$$

e dunque, per un atomo di numero atomico Z :

$$x_0 = -\frac{Ze}{m(-\omega^2 + \omega_0^2)} E$$

e dunque, essendo il dipolo $p = -e x_0$, possiamo ricavare la polarizzabilità per deformazione (atomica):

$$\alpha_{at} = \frac{Ze^2}{m(\omega_0^2 - \omega^2)} \quad (1.40)$$

Come si vede, la (1.40) diverge per $\omega = \omega_0$, e dunque ω_0 è la frequenza di risonanza dell'atomo considerato. Per $\omega \ll \omega_0$ sarà:

$$\alpha_{at} = \frac{Ze^2}{m\omega_0^2} \quad (1.41)$$

La frequenza ω_0 può essere valutata a partire dalla relazione di Plank $E_{mn} = \hbar\omega_{nm}$, essendo E_{nm} dell'ordine della decina di eV/c^2 . Per dare un limite superiore, l'energia di ionizzazione dell'atomo di idrogeno è $13.595 \text{ eV}/c^2$ e $\hbar = 6.583 \cdot 10^{-16} eVs$. Da questa stima verrebbe: $\omega_0 = 2.06 \cdot 10^{16} Hz$. D'altro canto, considerato che le polarizzabilità misurate sono dell'ordine di $10^{-24} cm^3$, possiamo scrivere:

$$\omega_0^2 = 10^{24} \frac{Ze^2}{m}$$

il rapporto tra la massa e la carica dell'elettrone è noto dagli esperimenti di Thompson (che confrontano la deflessione di un fascio di elettroni di energia nota da parte di un campo elettrico e magnetico) e la carica dell'elettrone dall'esperimento di Millikan:

$$\frac{e}{m} = 1.7 \cdot 10^{-11} C/g = 5.272 \text{ e.s.u./g}$$

$$e = 1.602 \cdot 10^{-19} C = 4.803 \cdot 10^{-10} \text{ e.s.u.}$$

Dunque, risulta:

$$\omega_0 \simeq Z^{1/2} 1.15 \cdot 10^{16} \text{ cycl/s}$$

pari a una frequenza di $\nu = \omega_0/2\pi = 2.4 \cdot 10^{15} \text{ Hz}$ e ad una lunghezza d'onda $\lambda = c/\nu = 1.25 \cdot 10^7 \text{ m}$, nell'ultravioletto.

Polarizzazione di una molecola biatomica in un reticolo

Consideriamo un cristallo ionico biatomico con due soli ioni di carica unitaria opposta per cella primitiva (per es. $NaCl = Na^+ + Cl^-$) sottoposto all'azione di un campo elettrico variabile nel tempo. Per effetto del campo, gli ioni positivi e negativi, si sposteranno dalle rispettive posizioni di equilibrio in direzioni opposte. Il dipolo elettrico indotto dallo spostamento delle cariche è:

$$p = e(u^+ - u^-) = ew$$

essendo $u^\pm$ lo spostamento delle cariche $\pm$ rispetto alla loro posizione di equilibrio. L'equazione del moto sarà:

$$M_+ \ddot{u}^+ = -K(u^+ - u^-) + eE \quad (1.42)$$

$$M_- \ddot{u}^- = -K(u^- - u^+) - eE \quad (1.43)$$

sottraendo membro a membro e detta $\frac{1}{M} = \frac{1}{M_+} + \frac{1}{M_-}$:

$$\ddot{w} = -2\frac{K}{M}w + 2\frac{e}{M}E$$

se, come al solito, cerchiamo soluzioni periodiche per un campo periodico, detta $\bar{\omega} = \sqrt{\frac{K}{M}}$, otteniamo:

$$-\omega^2 w_0 = -2\bar{\omega}^2 w_0 + \frac{2e}{M} E_0$$

da cui:

$$w_0 = \frac{eE_0}{2M(\bar{\omega}^2 - \omega^2)}$$

e possiamo ricavare la polarizzabilità molecolare:

$$\alpha_{mol} = \frac{p}{E} = \frac{e^2}{2M\bar{\omega}^2 \left(1 - \frac{\omega^2}{\bar{\omega}^2}\right)} \quad (1.44)$$

L'espressione 1.44, è sostanzialmente analoga a quella per la polarizzabilità atomica 1.41, solo, che la frequenza di risonanza in gioco, adesso è determinata dalle energie di vibrazione reticolari. Possiamo stimare queste energie dal modello di Debye, essere dell'ordine di $10^{-2} \div 10^{-1} eV$, e quindi da $\bar{\omega}$ sarà da 10 a 100 volte più piccola di quella atomica e quindi la polarizzabilità molecolare dipenderà significativamente dalla frequenza a frequenze tipiche della luce visibile e infrarossa. D'altro canto, siccome la massa a denominatore è quella del nucleo, che è 10^4 volte quella dell'elettrone a denominatore nella 1.41, le polarizzabilità statiche (cioè quelle per frequenze molto inferiori alla risonanza), sono comparabili. Questo significa che il modello di *ione rigido* che abbiamo considerato nel modello reticolare, non è giustificato e va considerata anche la polarizzabilità atomica dei singoli ioni. Il modo più semplice di fare ciò è semplicemente sommare le polarizzabilità degli ioni a quella reticolare:

$$\alpha = (\alpha^+ + \alpha^-) + \frac{e^2}{M(\bar{\omega}^2 - \omega^2)} \quad (1.45)$$

Anche se questo modello è molto naive e porta a risultati numericamente non molto realistici, qualitativamente mostra la struttura reale. Inserendo la 1.45 nella relazione di Clausius-Mossotti 1.37, otteniamo:

$$\frac{\epsilon(\omega) - 1}{\epsilon(\omega) + 2} = \frac{n}{3\epsilon_0} \left(\alpha^+ + \alpha^- + \frac{e^2}{M(\bar{\omega}^2 - \omega^2)} \right) \quad (1.46)$$

È conveniente scrivere $\epsilon(\omega)$ in funzione dei suoi valori limite $\epsilon(0)$ per $\omega \ll \bar{\omega}$ e $\epsilon(\infty)$ per $\bar{\omega} \ll \omega \ll \omega_0$. Infatti, la prima quantità è la polarizzabilità statica e la seconda è legata alla costante dielettrica a frequenze ottiche e dunque all'indice di rifrazione r del cristallo: $\epsilon(\infty) = r^{21}$.

$$\frac{\epsilon(0) - 1}{\epsilon(0) + 2} = \frac{n}{3\epsilon_0} \left(\alpha^+ + \alpha^- + \frac{e^2}{M\bar{\omega}^2} \right) \quad (1.47)$$

$$\frac{\epsilon(\infty) - 1}{\epsilon(\infty) + 2} = \frac{n}{3\epsilon_0} (\alpha^+ + \alpha^-) \quad (1.48)$$

sostituendo in 1.46, troviamo:

$$\frac{\epsilon(\omega) - 1}{\epsilon(\omega) + 2} = \frac{\epsilon(\infty) - 1}{\epsilon(\infty) + 2} + \frac{1}{1 - \frac{\omega^2}{\bar{\omega}^2}} \left(\frac{\epsilon(0) - 1}{\epsilon(0) + 2} - \frac{\epsilon(\infty) - 1}{\epsilon(\infty) + 2} \right)$$

¹Non si è usato il simbolo usuale n per l'indice di rifrazione per non confonderlo con la densità numerica dei dipoli

da cui possiamo trovare $\epsilon(\omega)$:

$$\epsilon(\omega) = \epsilon(\infty) + \frac{\epsilon(\infty) - \epsilon(0)}{\frac{\omega^2}{\omega_T^2} - 1} \quad (1.49)$$

ove

$$\omega_T^2 = \bar{\omega}^2 \left(\frac{\epsilon(\infty) + 2}{\epsilon(0) + 2} \right)$$

Catastrofe di polarizzazione

Dalla relazione di Clausius-Mossotti 1.37, si ricava che la costante dielettrica relativa

$$\epsilon_r = \frac{1 + \frac{2n\alpha}{3\epsilon_0}}{1 - \frac{1n\alpha}{3\epsilon_0}} \quad (1.50)$$

tende ad infinito per $n\alpha/\epsilon_0 = 3$ (catastrofe di polarizzazione). Siccome il valore di ϵ_r è molto sensibile alle piccole variazioni di $n\alpha/\epsilon_0$ attorno al suo valore critico, potremo sviluppare in serie:

$$\frac{n\alpha}{3\epsilon_0} = 1 - 3s$$

in cui $s \ll 1$. Sostituendo in 1.50, si ottiene:

$$\epsilon_r = \frac{1 - 2 - 6s}{1 - 1 - 3s} = \frac{1}{s} - 2 \sim \frac{1}{s}$$

La polarizzabilità α dipenderà dalla temperatura (quanto meno perché le distanze molecolari ci dipendono), dunque anche s . Supponiamo che vicino ad una temperatura critica T_c , la variazione sia lineare. Potremo scrivere che $s = \beta(T - T_c)$, allora

$$\epsilon_r = \frac{1}{\beta(T - T_c)}$$

diververà alla temperatura critica.

1.2.7 Teorie di campo medio

[...]

1.3 Conduzione elettrica

La conduzione elettrica si può vedere come un fenomeno di trasporto di cariche per effetto di un campo elettrico. Dal punto di vista macroscopico, se indichiamo con I l'intensità della corrente elettrica, ricordiamo che vale la legge di Ohm: $V = RI$ che lega il potenziale elettrico ai capi di un conduttore all'intensità di corrente tramite la resistenza elettrica che è una quantità che dipende dalla geometria e dalle caratteristiche fisiche del materiale. In particolare possiamo scrivere che

$$R = \frac{\rho \ell}{S}$$

ove ρ è la resistività specifica del materiale, ℓ la lunghezza del conduttore e S la sua sezione.

1.3.1 Elementi della teoria di Drude

Consideriamo il conduttore dal punto di vista microscopico come un gas di portatori liberi di carica, con densità n . La forza subita da una carica $-e$ immersa in un campo elettrico E sarà:

$$F = -eE = m \frac{d\mathbf{v}}{dt} \quad (1.51)$$

ove m è la massa del portatore (per es. l'elettrone o uno ione) e $\mathbf{v}$ la sua velocità. Dalla 1.51, ricaviamo la velocità al tempo t per effetto del campo:

$$\mathbf{v}(t) = -\frac{eE}{m}t \quad (1.52)$$

Supponiamo che i portatori di carica collidano fra di loro con una probabilità pari all'inverso del tempo medio τ fra le collisioni, allora la velocità media fra due urti successivi sarà:

$$\bar{\mathbf{v}} = \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \mathbf{v}(t) dt = -\frac{1}{\tau} \frac{e\mathbf{E}}{m} \frac{\tau^2}{2} = -\frac{e\mathbf{E}\tau}{2m} \quad (1.53)$$

Se definiamo la densità di corrente J come la densità di carica $-ne$ per la velocità media otteniamo:

$$J = \frac{ne^2\tau}{2m} \mathbf{E} \quad (1.54)$$

Questa equazione lega la densità di corrente J ad una quantità caratteristica del materiale. Siccome $I = \frac{de}{dt}$ e $\mathbf{E} = -\nabla V = -\frac{\partial V}{\partial \ell}$ sarà

$$-\frac{\partial V}{\partial \ell} = -R \frac{\partial I}{\partial \ell} = -RS \frac{\partial J}{\partial \ell} = \mathbf{E}$$

da cui:

$$\mathbf{E} = RJS$$

ovvero

$$\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E} \quad (1.55)$$

avendo definito la resistività del materiale con $\sigma = \frac{1}{\rho}$. Dal confronto con la 1.54, ricaviamo l'espressione della resistività:

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{2m} \quad (1.56)$$

1.3.2 Lavoro meccanico della corrente e legge di Joule

Il lavoro meccanico in presenza di un campo elettrico sarà

$$dL = q\mathbf{E} \cdot \mathbf{v} dt = \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{E} dV dt = \mathbf{J} \cdot \mathbf{E} dV dt$$

dalla 1.55 possiamo ricavare la potenza dissipata per unità di volume:

$$W = \frac{\partial^2 L}{\partial t \partial V} = \sigma \mathbf{E}^2 \quad (1.57)$$

che rappresenta la legge di Joule espressa per le densità.

1.3.3 Correnti di origine termica

La velocità media dei portatori di carica dovuta ad un gradiente di temperatura, si può calcolare dall'energia termica per portatore $\mathcal{E}(t)$. Un portatore che abbia subito l'ultima collisione in x' avrà un'energia termica $\mathcal{E}(T(x'))$; i portatori che arrivano ad un punto x da un punto a temperatura maggiore avranno subito l'ultima collisione in $x - v\tau$ e dunque la loro energia sarà: $\mathcal{E}(T(x - v\tau))$. Il loro contributo alla corrente sarà:

$$J(T_>) = \frac{n}{2} v \mathcal{E}(T(x - v\tau))$$

analogamente, per i portatori provenienti dal punto a temperatura inferiore:

$$J(T_<) = \frac{n}{2} (-v) \mathcal{E}(T(x + v\tau))$$

dunque, il flusso di energia dovuto allo spostamento di cariche è:

$$J(q) = \frac{1}{2} n v [\mathcal{E}(T(x - v\tau)) - \mathcal{E}(T(x + v\tau))]$$

Esprimendo la differenza in termini delle derivate:

$$J(q) = n v^2 \tau \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial T} \left(-\frac{\partial T}{\partial x} \right) \quad (1.58)$$

Il termine $n \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial T} = c_v$ è il calore specifico a volume costante. Possiamo passare al caso tridimensionale sostituendo alla velocità v la sua componente in una direzione e mediando su tutte le direzioni. Siccome $\langle v_x^2 \rangle = \langle v_y^2 \rangle = \langle v_z^2 \rangle = 1/3 v^2$, avremo:

$$J(q) = \frac{1}{3} v^2 \tau c_v (-\nabla T) \quad (1.59)$$

Dunque c'è una corrente elettrica proporzionale al gradiente del campo con una conduttività (termoelettrica) $k = \frac{1}{3} \tau v^2 c_v$. In condizioni di circuito aperto, questa porta all'accumulo di cariche sui bordi del conduttore e dunque ad un campo elettrico che si oppone al gradiente termico. L'esistenza di questo campo elettrico è nota come effetto Seebeck e si scrive convenzionalmente come:

$$\mathbf{E} = Q \nabla T \quad (1.60)$$

in cui la costante Q è nota come termopotenza. Per stimare Q , notiamo che, nel nostro modello monodimensionale, la velocità media in un punto x dovuta al gradiente termico è:

$$\mathbf{v}_Q = \frac{1}{2} [v(x - v\tau) - v(x + v\tau)] = -v\tau \frac{dv}{dx} = -\tau \frac{d}{dx} v^2$$

passando a tre dimensioni come prima:

$$v_Q = -\frac{\tau}{6} \frac{dv^2}{dT} \nabla T \quad (1.61)$$

La velocità media dovuta al campo elettrico è

$$\mathbf{v} = -\frac{e E \tau}{2m}$$

per avere $v_Q + v_E = 0$, sostituendo la 1.60 otteniamo:

$$\frac{\tau}{3} \frac{dv^2}{dT} \nabla T - \frac{eQ \nabla T \tau}{2m} = 0$$

da cui

$$Q = -\frac{1}{3e} \frac{d}{dT} \frac{mv^2}{2} = -\frac{1}{3e} \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial T} = -\frac{1}{3e} \frac{c_v}{n}$$

dunque indipendente dal tempo di rilassamento τ .

1.3.4 Conduzione nei materiali semiconduttori

I materiali semiconduttori, sono tipicamente isolanti covalenti. Esempi classici sono il Silicio ed il Germanio (ampiamente utilizzati nell'industria elettronica) con una distanza tra la banda di valenza e la banda di conduzione – la cosiddetta *gap* – rispettivamente di 1.12 eV e 0.67 eV alla temperatura ambiente 300K.

Per descrivere il comportamento dei materiali semiconduttori avremo bisogno di introdurre alcuni semplici concetti di meccanica quantistica.

Funzione d'onda ed Equazione di Schrödinger

In Meccanica Quantistica ad ogni particella è associata una funzione d'onda:

$$\psi(x, t) = \int e^{i\hbar(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{x})} d\mathbf{k} \quad (1.62)$$

che si propaga con una *velocità di gruppo* $v_g = \nabla_k \omega$ nella direzione di $\mathbf{k}$. Se E e p sono rispettivamente l'energia e l'impulso della particella ed m la sua massa, possiamo scrivere che

$$\mathbf{v}_g = \nabla_p E = \frac{\mathbf{p}}{m}$$

Seguendo l'ipotesi di De Broglie del dualismo onda-particella e l'osservazione di Einstein che l'energia dei fotoni era proporzionale alla loro frequenza tramite la costante di Planck:

$$E = \hbar \omega$$

sarà $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$. Con queste posizioni, se vogliamo ricavare l'espressione classica che lega energia ed impulso, a partire dalla funzione d'onda:

$$E = \frac{p^2}{2m} = \hbar \omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (1.63)$$

possiamo procedere per derivazione. Essendo:

$$\begin{aligned} E &= i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} \\ \mathbf{p} &= i\hbar \nabla \psi(\mathbf{x}, t) \end{aligned}$$

e dunque

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{x}, t) \quad (1.64)$$

Che è l'equazione di Schrödinger per particelle libere. In generale potremo scrivere:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{x}, t) = V(\mathbf{x}, t) \psi(\mathbf{x}, t) \quad (1.65)$$

essendo $V(\mathbf{x}, t)$ il potenziale a cui è soggetta la particella in questione.

La massa efficace

In un potenziale periodico, quale può essere quello a cui è sottoposto un portatore di carica in un cristallo, e nel caso di portatori non interagenti, la funzione d'onda della particella può essere scritta come:

$$\psi_{n,\mathbf{k}} = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \quad (1.66)$$

in cui $u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{x})$ è una funzione che ha la stessa periodicità del reticolo. La velocità del pacchetto d'onda è, come abbiamo detto:

$$\mathbf{v}_g = \nabla_k \omega = \frac{1}{\hbar} \nabla_k E$$

Sotto l'azione di una forza esterna $\mathbf{F}$, l'energia della particella, varierà come:

$$\frac{dE}{dt} = \mathbf{F} \cdot \mathbf{v}_g = \frac{1}{\hbar} \sum_i \frac{\partial E}{\partial k_i} F_i$$

D'altra parte, sviluppando la derivata temporale segue che:

$$\frac{dE}{dt} = \sum_i \frac{\partial E}{\partial k_i} \frac{\partial k_i}{\partial t}$$

da cui, per confronto si ricava che $\dot{\mathbf{k}} = \mathbf{F}/\hbar$, che non è un risultato banale, perché l'impulso cristallino $\hbar\mathbf{k}$, non è un impulso propriamente detto.

L'accelerazione subita è:

$$\dot{\mathbf{v}}_g = \frac{1}{\hbar} \sum_i \frac{\partial}{\partial k_i} \frac{\partial E}{\partial t} \mathbf{e}_i = \frac{1}{\hbar} \sum_i \mathbf{e}_i \frac{\partial}{\partial k_i} \sum_j \frac{\partial E}{\partial k_j} \frac{\partial k_j}{\partial t}$$

eseguendo le somme, si ottiene:

$$\dot{\mathbf{v}}_g = \frac{1}{\hbar} \sum_{i,j} \mathbf{e}_i \frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j} \frac{\partial k_j}{\partial t} \quad (1.67)$$

Dunque la particella si muove sotto l'azione di una forza $\mathbf{F} = \hbar \dot{\mathbf{k}}$ come se avesse una massa *efficace*:

$$m_{ij} = \frac{\hbar^2}{\frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j}} \quad (1.68)$$

Densità degli stati e numero di portatori

[Kittel, Introduction to Solid State Physics]

Dalla 1.63, nel caso stazionario, si ricava:

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

Su di un segmento di lato L , i valori permessi di k sono solo i multipli del valore minimo $k_{min} = \frac{2\pi}{L}$ e dunque in un volume L^3 il numero di stati possibili sarà

dato dal rapporto tra il volume della sfera di raggio k nello spazio degli impulsi ed il cubo di lato k_{min} :

$$N = \frac{\frac{4}{3}\pi k^3}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3} = \frac{V}{6\pi^2} k^3 \quad (1.69)$$

Dalla 1.63 ricaviamo $k = (2mE/\hbar^2)^{1/2}$ e lo sostituiamo nella 1.69 per ricavare il numero degli stati per unità di volume in funzione dell'energia E , tenendo anche conto che per ogni stato ci sono 2 possibili orientazioni dello spin degli elettroni:

$$n \equiv \frac{N}{V} = \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{2mE}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (1.70)$$

La densità energetica degli stati è definita come:

$$D(E) = \frac{dn}{dE} = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar} \right)^{\frac{3}{2}} E^{\frac{1}{2}} \quad (1.71)$$

Il numero di elettroni in banda di conduzione ad una temperatura T , si ricava dalla densità di stati e dalla statistica di Boltzmann:

$$n_c(T) = \int_{E_c}^{\infty} D(E) e^{\frac{E-\mu}{kT}} dE \quad (1.72)$$

essendo E_c il livello in energia della base della banda di conduzione e μ il potenziale chimico. Sostituendo la 1.71 nella 1.72 otteniamo l'espressione del numero di elettroni in banda di conduzione alla temperatura T :

$$n_c(T) = 2 \left(\frac{m_e kT}{2\pi\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{\mu-E_c}{kT}} \quad (1.73)$$

in cui m_e è la massa efficace degli elettroni in banda di conduzione. Un'espressione analoga può essere scritta per le lacune in banda di valenza.

$$n_v(T) = 2 \left(\frac{m_h kT}{2\pi\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{E_v-\mu}{kT}} \quad (1.74)$$

Moltiplicando fra loro le 1.73 e 1.74, si nota che il prodotto non dipende dal potenziale chimico ma solo dalla differenza di energia tra la banda di valenza e quella di conduzione $E_c - E_v = -E_g$:

$$np = 4 \left(\frac{kT}{2\pi\hbar^2} \right)^3 (m_e m_h)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{-E_g}{kT}} \quad (1.75)$$

In un semiconduttore intrinseco, tutti gli elettroni che vanno in banda di conduzione lasciano una lacuna in banda di valenza e dunque, per loro, $n = p$. Per questi materiali, dunque, il numero totale di portatori di carica è:

$$n = 2 \left(\frac{kT}{2\pi\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} (m_e m_h)^{\frac{3}{4}} e^{\frac{-E_g}{2kT}} \quad (1.76)$$

La mobilità intrinseca è la grandezza della velocità di drift per unità di campo: $\mu_i = |v_i|/E$ ed è positiva, sia per le lacune sia per gli elettroni. La conducibilità è la somma:

$$\sigma = ne\mu_e + pe\mu_h$$