

Elettronica dello Stato Solido

Lezione 11: **Statistica dei portatori**



Daniele Ielmini

DEIB – Politecnico di Milano

daniele.ielmini@polimi.it

Outline

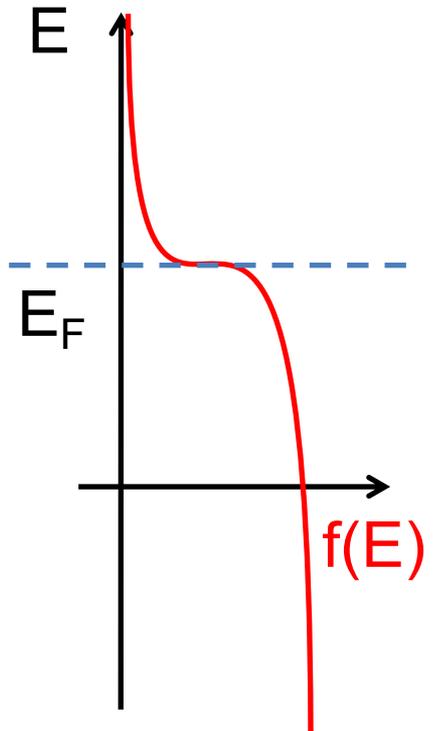
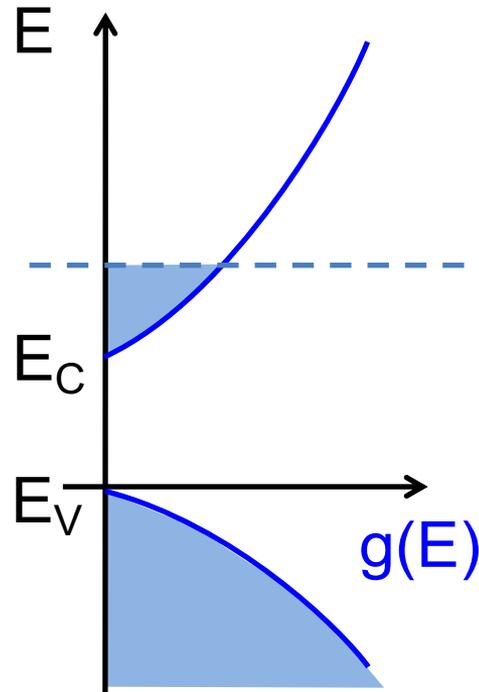
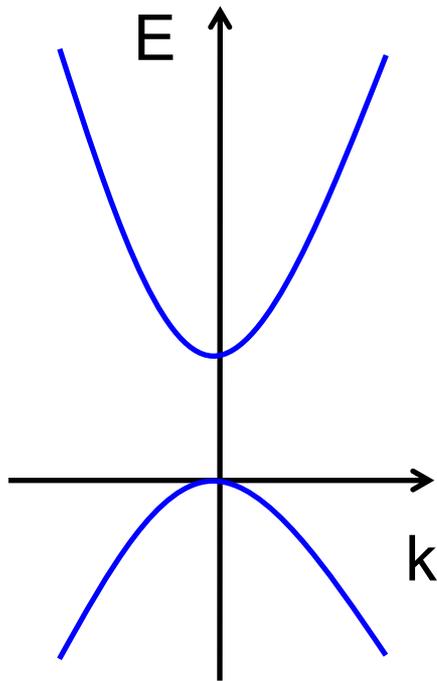
- Densità di portatori in
 - Metalli
 - Semiconduttori/isolanti
- Densità di stati in approssimazione parabolica (1D, 2D, 3D)
- Statistica di particelle
 - Fermi-Dirac
 - Bose-Einstein
 - Maxwell-Boltzmann
- Conclusioni

Introduzione

- Per calcolare la densità di corrente di elettroni $j = -qnv$ nei semiconduttori/metalli abbiamo bisogno di:
 - Velocità $v = \mu F$
 - Densità di portatori n che partecipano al trasporto \rightarrow banda di conduzione
- La densità di portatori si ottiene come prodotto di densità di stati per probabilità di occupazione, da integrare sull'energia

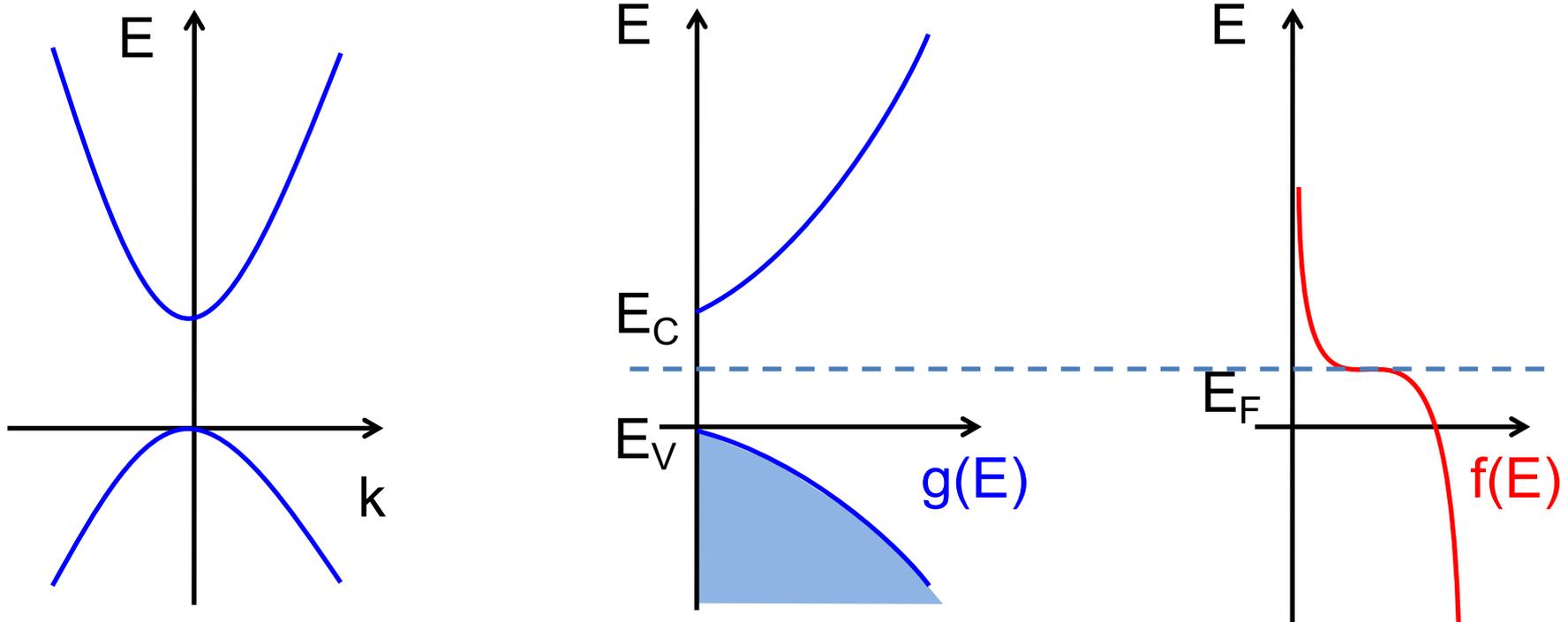
$$n = \int_{E_c}^{\infty} g(E) f(E) dE$$

Metalli



- Il livello di Fermi (potenziale chimico degli elettroni nel solido, funge da confine tra stati occupati e vuoti) è allineato con una banda → la banda è parzialmente piena → alta conducibilità elettrica e termica

Semiconduttori/isolanti

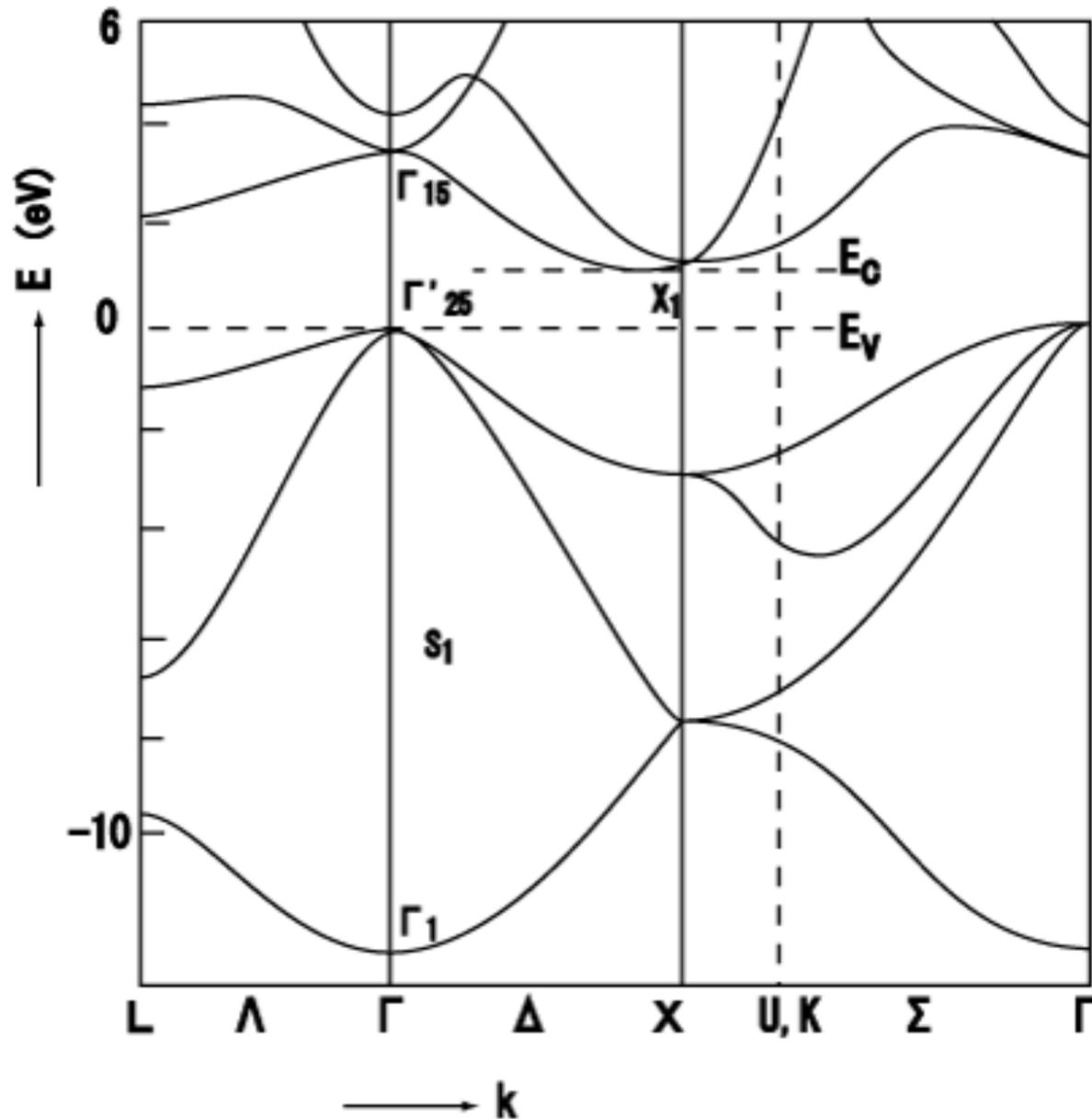


- Il livello di Fermi (potenziale chimico degli elettroni nel solido, funge da confine tra stati occupati e vuoti) è allineato con un gap → la banda è completamente piena (valenza) o vuota (conduzione) a $T = 0$ K, bassa conducibilità elettrica e termica

Outline

- Densità di portatori in
 - Metalli
 - Semiconduttori/isolanti
- Densità di stati in approssimazione parabolica (1D, 2D, 3D)
- Statistica di particelle
 - Fermi-Dirac
 - Bose-Einstein
 - Maxwell-Boltzmann
- Conclusioni

Struttura a bande reale



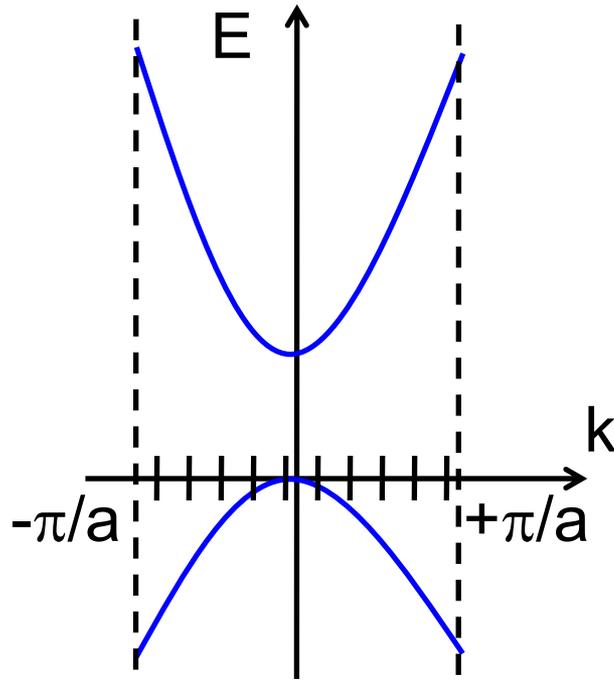
Approssimazione parabolica

- Dato che i fenomeni di trasporto e ottici avvengono normalmente in corrispondenza del fondo/apice della banda di conduzione/valenza, è legittimo adottare l'approssimazione parabolica

$$E = E_c + \frac{\hbar^2}{2m_e^*} k^2$$

per ricavare una formula analitica per la densità di stati $g(E)$

Densità di stati 1D



- Condizioni periodiche al contorno:

$$\psi(\mathbf{Na}) = \psi(0)$$

$$u(\mathbf{Na})e^{ikNa} = u(0) \rightarrow e^{ikNa} = 1 \rightarrow \mathbf{k} = \frac{2\pi}{Na} \mathbf{n}$$

$$\mathbf{n} = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, +\frac{N}{2}$$

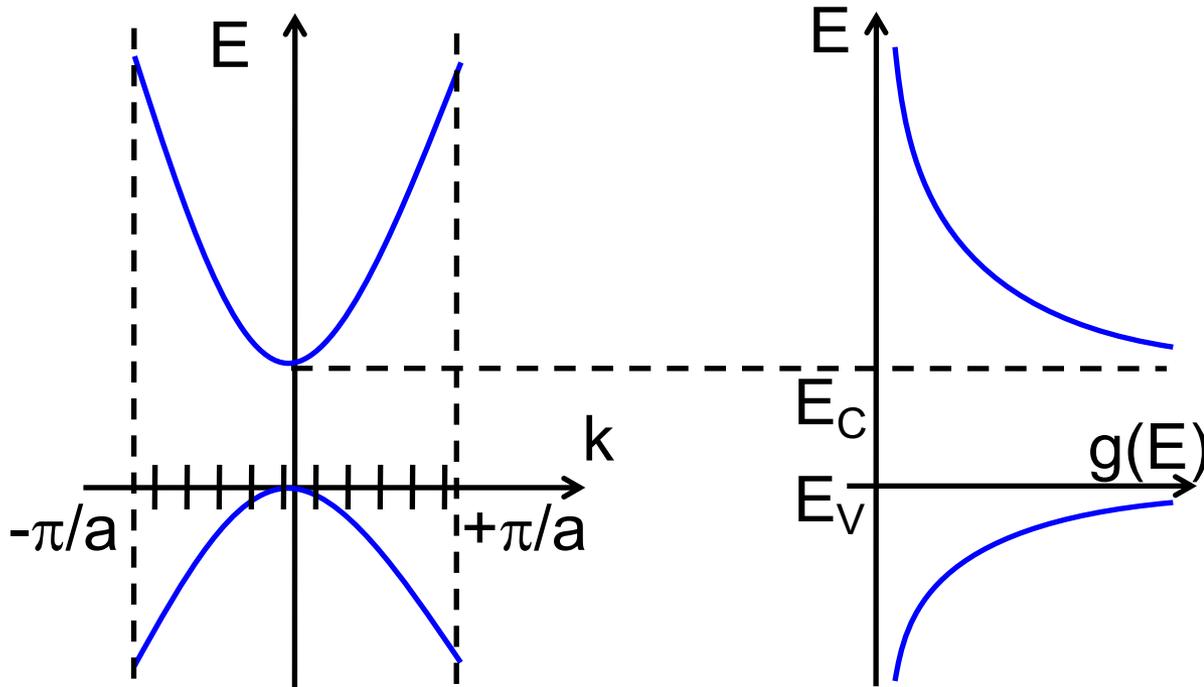
- Due stati sull'asse k distano pertanto $\Delta k = \frac{2\pi}{Na}$

e la densità è Lunghezza tra k e k+dk

$$g(k)dk = \underset{\text{Spin}}{g_s} \frac{\eta dk}{\Delta k} \frac{1}{\Omega} = 2 \frac{2dk}{2\pi / Na} \frac{1}{Na} = \frac{2}{\pi} dk$$

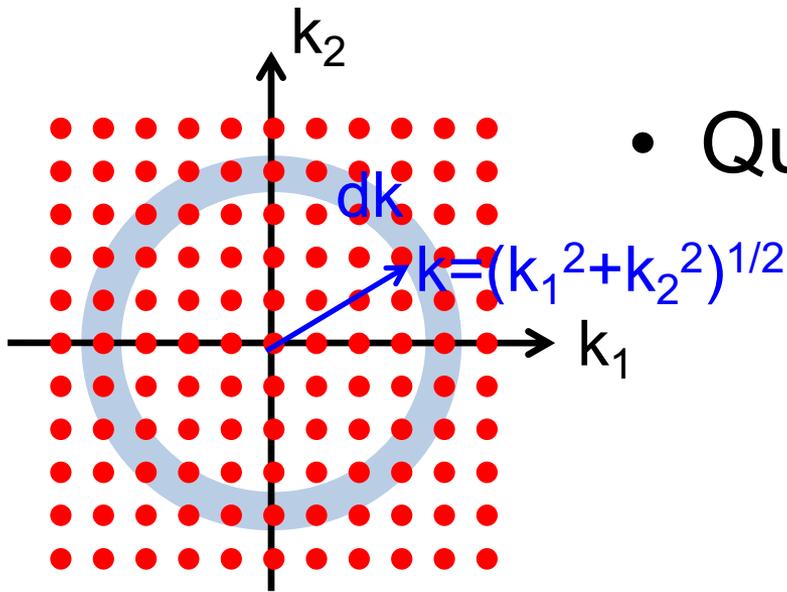
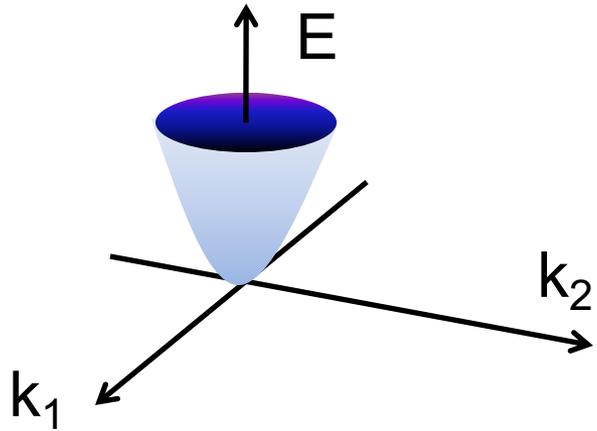
Volume
cristallo

Densità di stati 1D



- Densità in energia: $g(E)dE = g(k)dk$
- Relazione E-k: $E = E_C + \frac{\hbar^2}{2m_e^*} k^2 \rightarrow \frac{dE}{dk} = \frac{\hbar^2}{m_e^*} k$
- Quindi $g_{1D}(E) = g(k) \frac{dk}{dE} = \frac{2}{\pi} \frac{m_e^*}{\hbar^2 k} = \frac{1}{\pi \hbar} \sqrt{\frac{2m_e^*}{E - E_C}}$

Densità di stati 2D



- Condizioni periodiche al contorno:

$$\mathbf{k}_1 = \frac{2\pi}{N_1 \mathbf{a}_1} \mathbf{n}_1, \mathbf{k}_2 = \frac{2\pi}{N_2 \mathbf{a}_2} \mathbf{n}_2$$

- Volume associato allo stato \mathbf{k} :

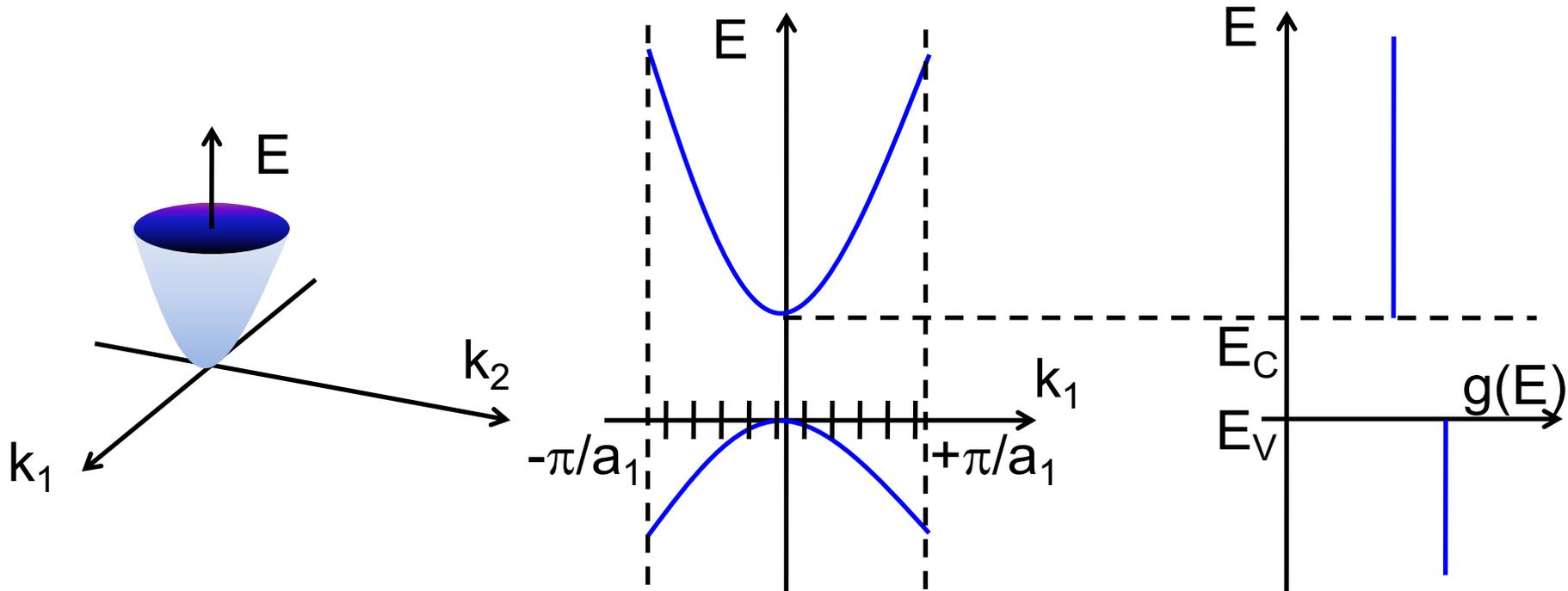
$$(\Delta \mathbf{k})^2 = \frac{(2\pi)^2}{N_1 \mathbf{a}_1 N_2 \mathbf{a}_2} = \frac{(2\pi)^2}{\Omega}$$

- Quanti stati tra \mathbf{k} e $\mathbf{k} + d\mathbf{k}$?

$$g(\mathbf{k}) d\mathbf{k} = \underset{\text{Spin}}{2} \frac{\text{Area tra } \mathbf{k} \text{ e } \mathbf{k} + d\mathbf{k}}{(2\pi)^2 / \Omega} \frac{1}{\Omega} = \frac{\mathbf{k}}{\pi} d\mathbf{k}$$

Volume (area) del cristallo

Densità di stati 2D



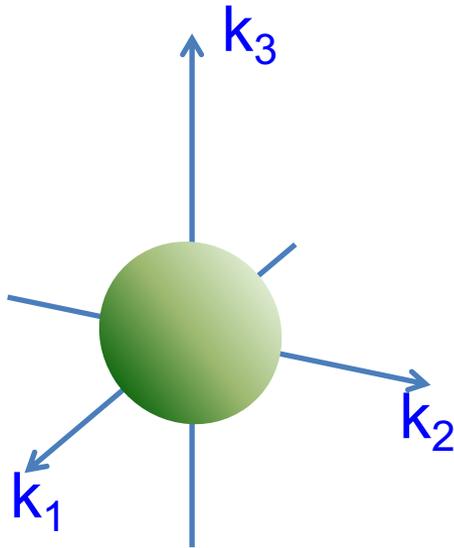
- Relazione E-k:

$$E = E_C + \frac{\hbar^2}{2m_e^*} (\mathbf{k}_1^2 + \mathbf{k}_2^2) = E_C + \frac{\hbar^2}{2m_e^*} k^2 \rightarrow \frac{dE}{dk} = \frac{\hbar^2}{m_e^*} k$$

- Quindi:

$$g(E)dE = g(k)dk \rightarrow g_{2D}(E) = \frac{k m_e^*}{\pi \hbar^2 k} = \frac{m_e^*}{\pi \hbar^2}$$

Densità di stati 3D



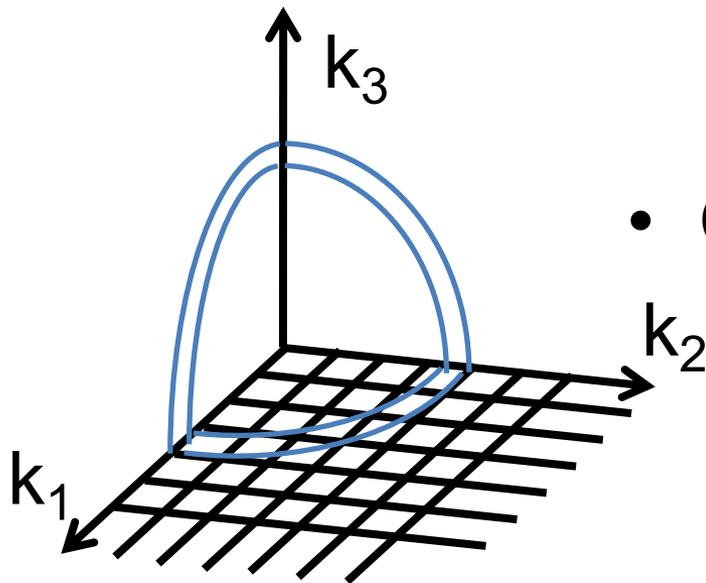
- Condizioni periodiche al contorno:

$$k_1 = \frac{2\pi}{N_1 a_1} n_1, k_2 = \frac{2\pi}{N_2 a_2} n_2, k_3 = \frac{2\pi}{N_3 a_3} n_3$$

- Volume associato allo stato k :

$$(\Delta k)^3 = \frac{(2\pi)^3}{N_1 a_1 N_2 a_2 N_3 a_3} = \frac{(2\pi)^3}{\Omega}$$

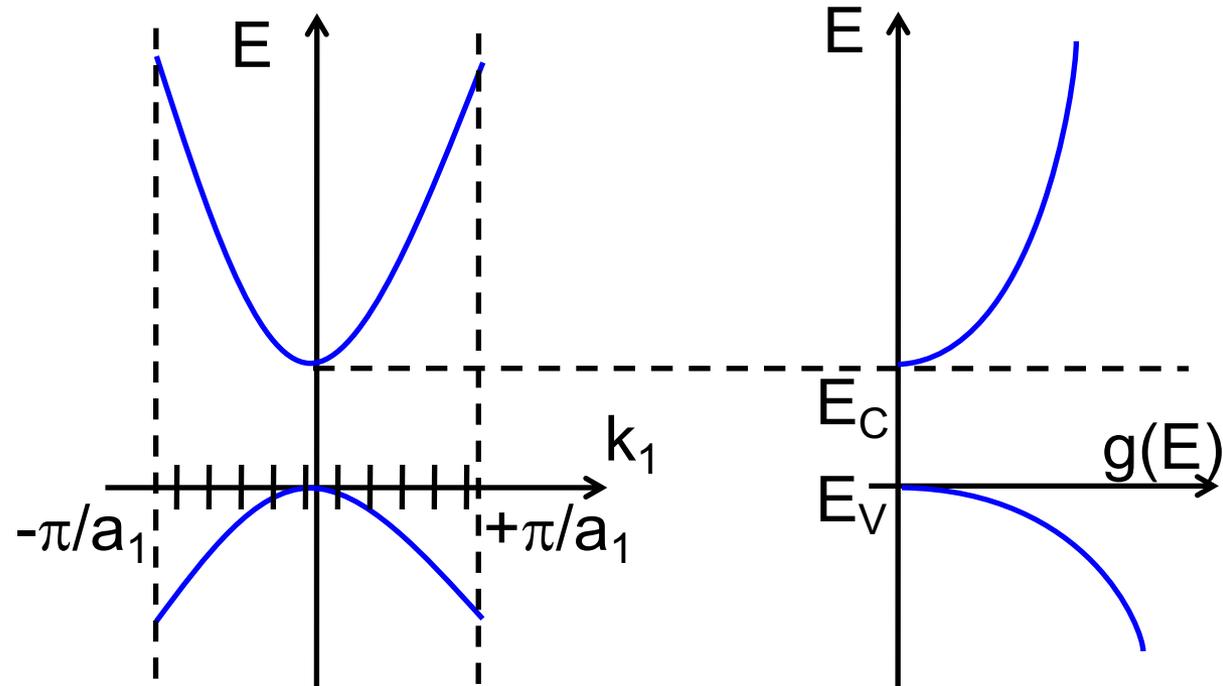
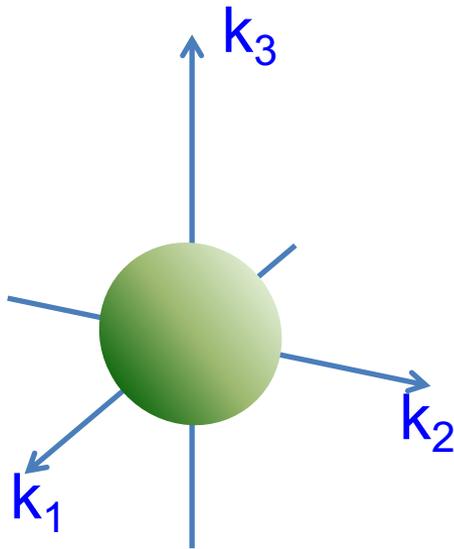
- Quanti stati tra k e $k+dk$?



$$g(k)dk = \underset{\text{Spin}}{2} \frac{\text{Volume tra } k \text{ e } k+dk}{(2\pi)^3 / \Omega} \frac{1}{\Omega} = \frac{k^2}{\pi^2} dk$$

Densità per area unitaria

Densità di stati 3D



- Relazione E-k:

$$E = E_C + \frac{\hbar^2}{2m_e^*} (\mathbf{k}_1^2 + \mathbf{k}_2^2 + \mathbf{k}_3^2) = E_C + \frac{\hbar^2}{2m_e^*} \mathbf{k}^2 \rightarrow \frac{dE}{dk} = \frac{\hbar^2}{m_e^*} \mathbf{k}$$

- Quindi:

$$g(E)dE = g(\mathbf{k})d\mathbf{k} \rightarrow g_{3D}(E) = \frac{\mathbf{k}^2}{\pi^2} \frac{m_e^*}{\hbar^2 \mathbf{k}} = \frac{(2m_e^*)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E - E_C}$$

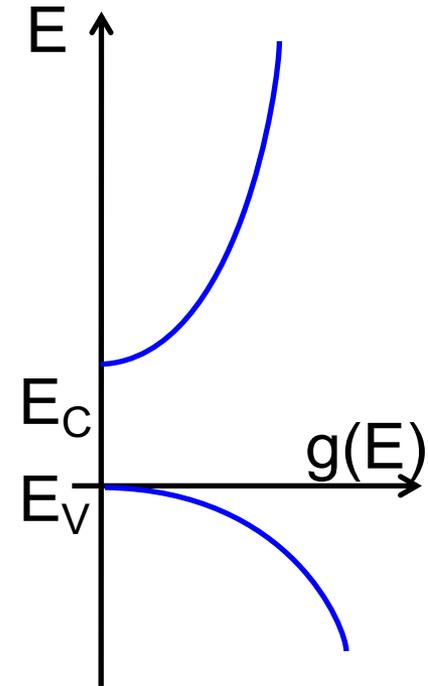
Massa efficace DOS

- Banda di conduzione:

$$g_c(E) = \frac{(2m_n^*)^{3/2}}{2\pi^2\hbar^3} \sqrt{E - E_c}$$

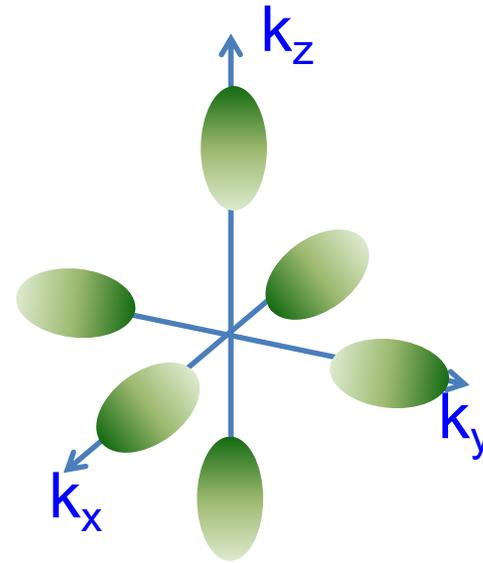
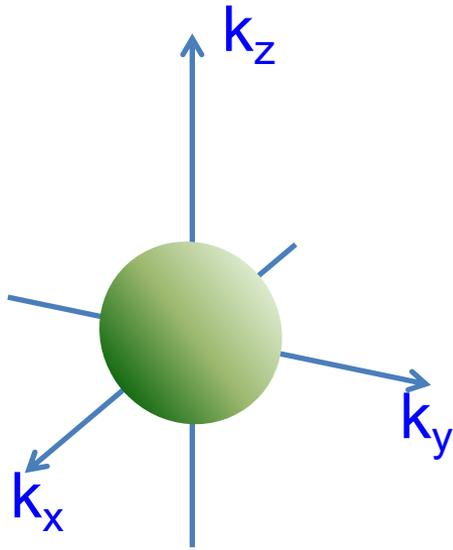
- Banda di valenza:

$$g_v(E) = \frac{(2m_p^*)^{3/2}}{2\pi^2\hbar^3} \sqrt{E_v - E}$$



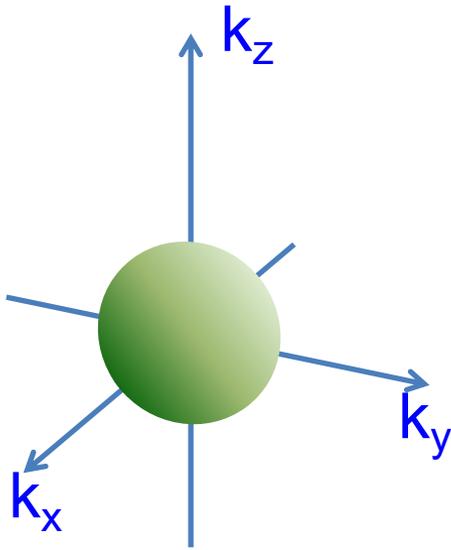
- Le masse m_n^* e m_p^* sono chiamate masse efficaci DOS (density of states)
- Per minimi/massimi unici (Γ) e isotropi le masse DOS coincidono con la massa del portatore, e.g. $m_n^* = m_e^*$ per la banda di conduzione del GaAs

Casi degeneri/anisotropi



- Per casi degeneri (e.g. valli multiple in banda di conduzione) e/o anisotropi (e.g. masse trasversali e longitudinali), dobbiamo ricavare una massa DOS tale che la sfera di Fermi equivalente (m_n^* isotropa) contenga lo stesso numero di stati degli ellissoidi (m_t^* , m_l^*) di Fermi reali \rightarrow stesso volume (k equidistribuiti)

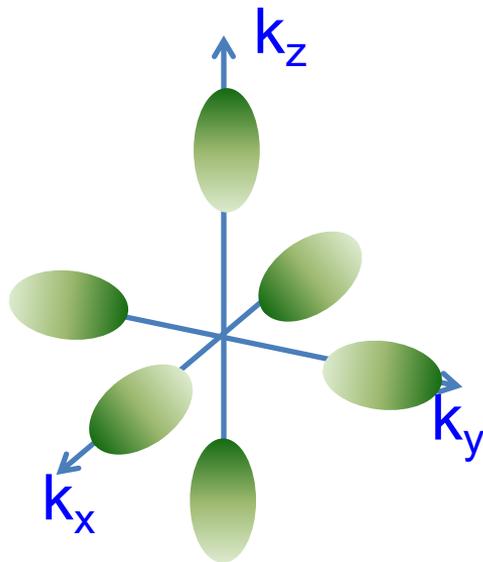
Casi degeneri/anisotropi



$$E - E_c = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_n^*} \rightarrow \frac{\mathbf{k}_1^2 + \mathbf{k}_2^2 + \mathbf{k}_3^2}{k_{\text{eff}}^2} = 1$$

$$k_{\text{eff}} = \frac{\sqrt{2m_n^*(E - E_c)}}{\hbar}$$

$$\text{vol} = \frac{4}{3} \pi k_{\text{eff}}^3 = \frac{4}{3} \pi \left(2m_n^* \frac{E - E_c}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}}$$



$$E - E_c = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_1^2}{2m_l^*} + \frac{\hbar^2 (\mathbf{k}_2^2 + \mathbf{k}_3^2)}{2m_t^*} \rightarrow \frac{\mathbf{k}_1^2}{\alpha^2} + \frac{\mathbf{k}_2^2 + \mathbf{k}_3^2}{\beta^2} = 1$$

$$\alpha = \frac{\sqrt{2m_l^*(E - E_c)}}{\hbar}, \beta = \frac{\sqrt{2m_t^*(E - E_c)}}{\hbar}$$

$$\text{vol} = g \frac{4}{3} \pi \alpha \beta^2 = g \frac{4}{3} \pi \left(m_l^* m_t^{*2} \right)^{\frac{1}{2}} \left(2 \frac{E - E_c}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}}$$

Massa DOS di Si e Ge

- Ponendo uguali i volumi (pari numero, e quindi densità, di stati per ogni energia) si ottiene:

$$m_n^{*\frac{3}{2}} = g \left(m_l^* m_t^{*2} \right)^{\frac{1}{2}} \rightarrow m_n^* = g^{\frac{2}{3}} m_l^{*\frac{1}{3}} m_t^{*\frac{2}{3}}$$

- In banda di valenza, si deve tenere conto della degenerazione hh/lh: basta sommare le densità di stati ($g_V = g_{hh} + g_{lh}$), ottenendo:

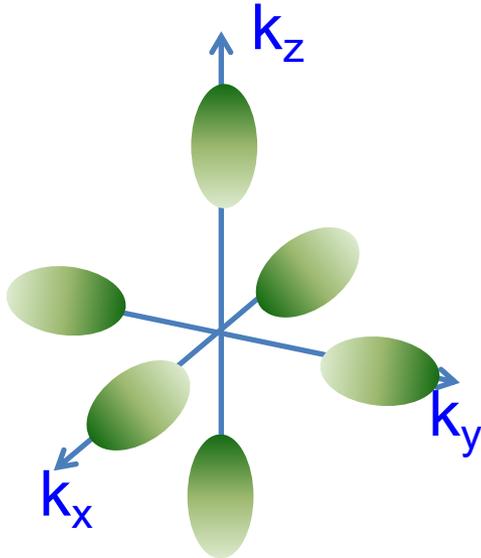
$$m_p^* = \left(m_{hh}^{*\frac{3}{2}} + m_{lh}^{*\frac{3}{2}} \right)^{\frac{2}{3}}$$

Masse DOS in Ge, Si, GaAs

- Masse DOS in banda di conduzione:
 - Ge: $m_n^*/m_0 = 4^{2/3} 1.59^{1/3} 0.0815^{2/3} = 0.553$
 - Si: $m_n^*/m_0 = 6^{2/3} 0.916^{1/3} 0.19^{2/3} = 1.06$
 - GaAs: $m_n^*/m_0 = m_e^*/m_0 = 0.067$
- Masse DOS in banda di valenza
 - Ge: $m_p^*/m_0 = (0.347^{3/2} + 0.0429^{3/2})^{2/3} = 0.357$
 - Si: $m_p^*/m_0 = (0.537^{3/2} + 0.153^{3/2})^{2/3} = 0.59$
 - GaAs: $m_p^*/m_0 = (0.51^{3/2} + 0.082^{3/2})^{2/3} = 0.532$

Massa di conduzione

- Si impiega ai fini del calcolo della mobilità
- Le diverse masse danno contributi in parallelo alla conduzione: dato che la conducibilità è inversamente proporzionale alla massa, la media deve effettuarsi sull'inverso delle masse



$$\frac{1}{m_c^*} = \frac{\frac{2}{m_l^*} + \frac{2}{m_t^*} + \frac{2}{m_t^*}}{6} \rightarrow m_c^* = \frac{3}{\frac{1}{m_l^*} + \frac{2}{m_t^*}}$$

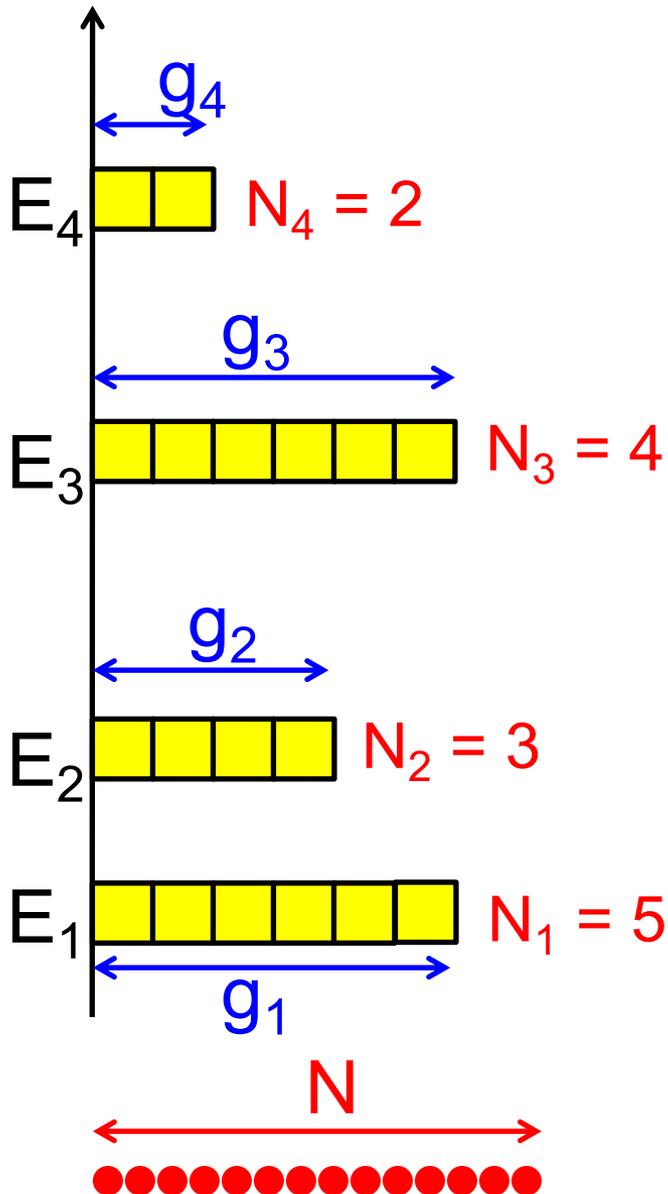
$$m_c^*/m_0 = 0.26 \text{ (Si)}$$

$$m_c^*/m_0 = 0.12 \text{ (Ge)}$$

Outline

- Densità di portatori in
 - Metalli
 - Semiconduttori/isolanti
- Densità di stati in approssimazione parabolica (1D, 2D, 3D)
- Statistica di particelle
 - Fermi-Dirac
 - Bose-Einstein
 - Maxwell-Boltzmann
- Conclusioni

Statistica di particelle



- Problema: sistema con N particelle identiche e debolmente interagenti, volume costante
- Livelli in energia discreti che raggruppiamo in gruppi di g_j stati a energia E_j
- Occupazione (0/1) degli E_j equiprobabile
- g_j = degenerazione
- N_j = numero di particelle sul livello E_j (distribuite sui g_j stati)

Numero di configurazioni

- Quante sono le possibili configurazioni di un particolare stato del sistema?
- Numero di configurazioni = W
- Lo stato del sistema con il massimo numero di configurazioni rappresenta il più probabile \rightarrow stato di equilibrio
- Il massimo numero di configurazioni coincide con il massimo dell'entropia:

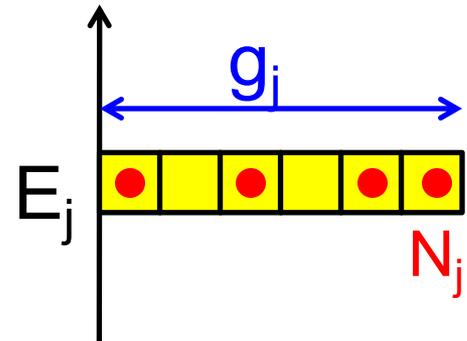
$$S = k \log W$$

Statistica di Fermi-Dirac – 1

- Particelle indistinguibili: dalla meccanica quantistica, lo scambio di due particelle tra i rispettivi stati non è rilevabile da nessuna misura fisica
- In ogni stato è possibile collocare una sola particella (principio di esclusione di Pauli)
- Nota: gli stati sono sempre a coppie, spin
↑↓
- Stato del sistema = N_j particelle sul livello E_j

Statistica di Fermi-Dirac – 2

- In quanti modi posso collocare N_j palline in g_j stati?



- La prima in g_j modi, la seconda in g_j-1 , la terza in g_j-2 .. l'ultima in $g_j-N_j+1 \rightarrow$

$$\frac{g_j!}{(g_j - N_j)!}$$

- Particelle indistinguibili \rightarrow il numero è da ridurre per le permutazioni di N_j particelle \rightarrow

$$\frac{g_j!}{N_j!(g_j - N_j)!}$$

- Estendendo alla sequenza di livelli energetici \rightarrow

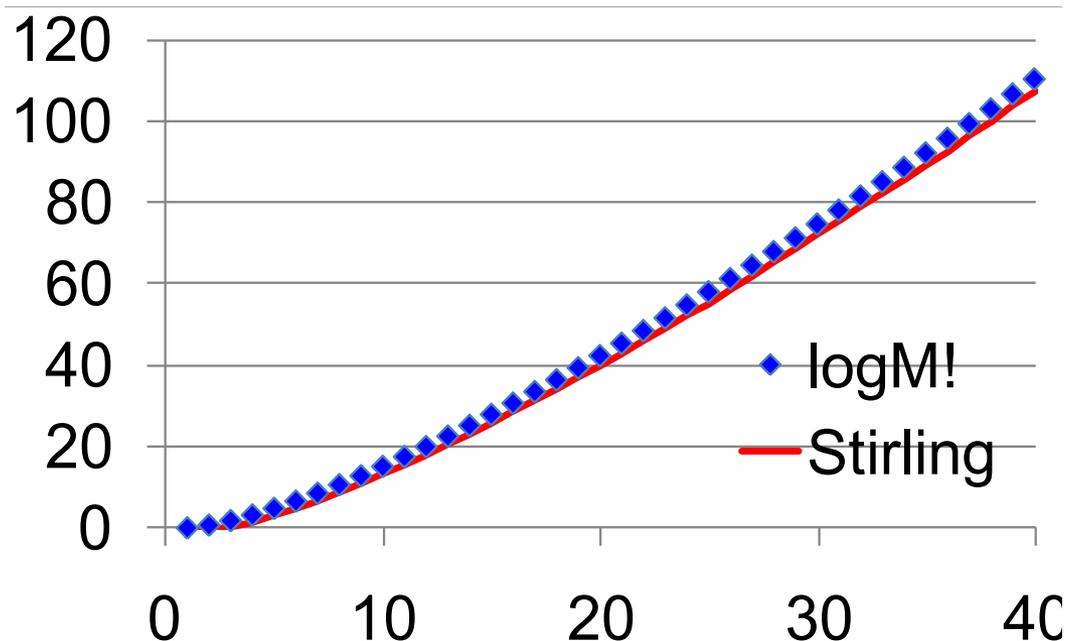
$$W_{FD} = \prod_j \frac{g_j!}{N_j!(g_j - N_j)!}$$

Formula di Stirling

- Calcoliamo il logaritmo $\log W_{FD}$:

$$\log W_{FD} = \sum_j \log g_j! - \sum_j \log N_j! - \sum_j \log (g_j - N_j)!$$

- Formula di Stirling $\log x! = x \log x - x$



Condizione di massimo vincolato

- Quindi:

$$\begin{aligned}\log \mathbf{W}_{FD} &= \sum_j (\mathbf{g}_j \log \mathbf{g}_j - \cancel{\mathbf{g}_j}) - \sum_j (\mathbf{N}_j \log \mathbf{N}_j - \cancel{\mathbf{N}_j}) + \\ &\quad - \sum_j ((\mathbf{g}_j - \mathbf{N}_j) \log (\mathbf{g}_j - \mathbf{N}_j) - \cancel{(\mathbf{g}_j - \mathbf{N}_j)}) \\ &= \sum_j (\mathbf{g}_j \log \mathbf{g}_j - \mathbf{N}_j \log \mathbf{N}_j - (\mathbf{g}_j - \mathbf{N}_j) \log (\mathbf{g}_j - \mathbf{N}_j))\end{aligned}$$

- Massimizziamo $\log \mathbf{W}_{FD}$: $\delta \log \mathbf{W}_{FD} = \sum_j \frac{\partial \log \mathbf{W}_{FD}}{\partial \mathbf{N}_j} \delta \mathbf{N}_j = 0$

- Con i vincoli:

$$\delta \mathbf{N} = \sum_j \delta \mathbf{N}_j = 0$$

$$\delta \mathbf{U} = \sum_j \mathbf{E}_j \delta \mathbf{N}_j = 0$$

Moltiplicatori di Lagrange

- Se devo trovare il massimo di una funzione a 2 variabili $f(x,y)$ sottoposto al vincolo $g(x,y)=c$, cerco le soluzioni tra i punti di stazionarietà della funzione

$$f(x,y) - \lambda(g(x,y) - c)$$

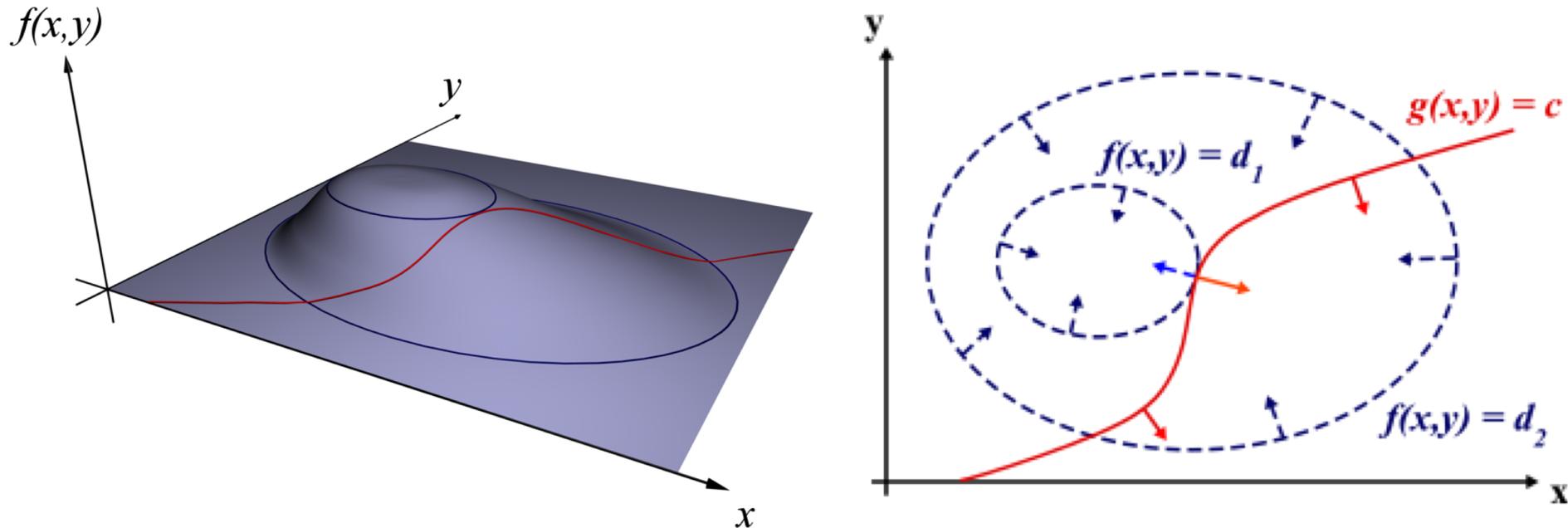
- Nel nostro caso quindi impongo:

$$\delta \log W_{FD} - a\delta N - b\delta U = \sum_j \left(\frac{\partial \log W_{FD}}{\partial N_j} - a - bE_j \right) \delta N_j = 0$$

- Ma data l'indipendenza dei δN_j , la soluzione è che ogni termine nella sommatoria si annulli:

$$\frac{\partial \log W_{FD}}{\partial N_j} - a - bE_j = 0$$

Metodo MDL



- Funzione $f(x,y)$ valutata sulla curva $g(x,y)=c$
- Nel punto di massimo vincolato, il contour di f e la curva $g(x,y)=c$ sono tangenti
- Equivalentemente, in quel punto il gradiente di $f(x,y)$ e quello di $g(x,y)-c$ sono paralleli, i.e. proporzionali, con coefficiente di proporzionalità λ

Risultato

- Sostituendo $\log W_{FD} = \sum_j (g_j \log g_j - N_j \log N_j - (g_j - N_j) \log (g_j - N_j))$
- Trovo: $\frac{\partial \log W_{FD}}{\partial N_j} = -\log N_j - 1 + \log (g_j - N_j) + 1 = a + bE_j$
- E quindi $\frac{g_j - N_j}{N_j} = e^{a+bE_j} \rightarrow N_j = \frac{g_j}{e^{a+bE_j} + 1}$
- Ricavo una probabilità di occupazione:
$$f_{j,FD} = \frac{N_j}{g_j} = \frac{1}{e^{a+bE_j} + 1}$$
- Significato di a , b ? serve supporto dalla teoria termodinamica

Prima legge della termodinamica

- L'energia in un processo termodinamico si conserva (non può essere creata o distrutta, ma solo trasformata)

$$dU = \delta Q - \delta L$$

- Dove U = energia interna (energia immagazzinata nel sistema), Q = calore (trasferimento di energia da sorgente calda) e L = lavoro fatto dal sistema
- Tradotto in differenziali esatti:

$$dU = TdS - PdV + \mu dN$$

- Dove si è incluso anche lo scambio di energia sotto forma di materia, con μ = potenziale chimico delle particelle N
- La variazione di entropia a volume costante è quindi:

$$dS = \frac{dU}{T} - \frac{\mu}{T} dN$$

Interpretazione termodinamica

- Confrontiamola con l'espressione:

$$\delta \log W_{FD} - a\delta N - b\delta U = 0$$

- dove $S = k \log W$, quindi

$$dS = bkdU + akdN$$

$$dS = \frac{dU}{T} - \frac{\mu}{T} dN$$

→

$$b = \frac{1}{kT}$$

$$a = -\frac{\mu}{kT}$$

- e la distribuzione Fermi Dirac diventa:

$$N_j = \frac{g_j}{e^{a+bE_j} + 1} = \frac{g_j}{e^{\frac{E_j - \mu}{kT}} + 1}$$

$$\mu = E_F$$

Energia di Fermi =
potenziale chimico
degli elettroni

Argomento semplificato

- Dal risultato della massimizzazione con i moltiplicatori di Lagrange, posso adottare i seguenti argomenti:
 - La distribuzione f deve essere pari a $\frac{1}{2}$ in $E_F = \mu =$ potenziale chimico degli elettroni

$$f_{FD}(E_F) = \frac{1}{e^{a+bE_F} + 1} = \frac{1}{2} \rightarrow a + bE_F = 0 \rightarrow a = -bE_F$$

- La distribuzione deve tendere alla Maxwell-Boltzmann per E grande $\rightarrow b=1/kT$

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

Fermioni e bosoni

- Entrambe le particelle sono indistinguibili tra loro, cioè:
 - non è possibile etichettare le particelle, oppure
 - lo stato con particella 1 in a e la particella 2 in b non è distinguibile dallo stato con particella 1 in b e la particella 2 in a)
- Funzione d'onda: $\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \varphi_a(\mathbf{x}_1)\varphi_b(\mathbf{x}_2)$ **NO!**
- Simmetrizzazione:
 - Bosoni $\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_a(\mathbf{x}_1)\varphi_b(\mathbf{x}_2) + \varphi_a(\mathbf{x}_2)\varphi_b(\mathbf{x}_1))$
 - Fermioni $\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_a(\mathbf{x}_1)\varphi_b(\mathbf{x}_2) - \varphi_a(\mathbf{x}_2)\varphi_b(\mathbf{x}_1))$

Fermioni e bosoni

- Conseguenza 1: funzione pari (bosone) o dispari (fermione) rispetto all'operazione di scambio di particelle
- Conseguenza 2: la funzione d'onda di due fermioni nello stesso stato è identicamente nulla

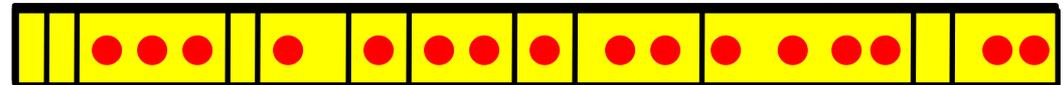
$$\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_a(\mathbf{x}_1)\varphi_a(\mathbf{x}_2) - \varphi_a(\mathbf{x}_2)\varphi_a(\mathbf{x}_1)) = 0$$

- → impossibile per due fermioni condividere lo stesso stato → principio di esclusione di Pauli
- Nessuna restrizione per bosoni → condensazione di Bose (tutte le particelle nello stesso stato a 0 K)

Statistica di Bose-Einstein

- Particelle indistinguibili (come FD)
- In ogni stato è possibile collocare un numero illimitato di particelle
- In quanti modi posso collocare N_j palline in g_j stati?

$$g_j = 12 \quad N_j = 16$$



- Il problema equivale a permutare N_j palline e $g_j - 1$ barriere tra stati $\rightarrow (N_j + g_j - 1)!$
- Da ridurre per le permutazioni di N_j particelle e $g_j - 1$ barriere $\rightarrow \frac{(N_j + g_j - 1)!}{N_j! (g_j - 1)!}$

- Estendendo a tutti gli $E_j \rightarrow$

$$W_{BE} = \prod_j \frac{(N_j + g_j - 1)!}{N_j! (g_j - 1)!}$$

Massimizzazione di $W_{BE} - 1$

- Calcoliamo il logaritmo $\log W_{BE}$:

$$\begin{aligned}\log W_{BE} &= \sum_j \log(\mathbf{N}_j + \mathbf{g}_j - 1)! - \sum_j \log \mathbf{N}_j! - \sum_j \log(\mathbf{g}_j - 1)! \\ &= \sum_j \left[(\mathbf{N}_j + \mathbf{g}_j - 1) \log(\mathbf{N}_j + \mathbf{g}_j - 1) - \mathbf{N}_j \log \mathbf{N}_j - (\mathbf{g}_j - 1) \log(\mathbf{g}_j - 1) \right]\end{aligned}$$

- Condizione di massimo vincolato:

$$\delta \log W_{BE} = \sum_j \frac{\partial \log W_{BE}}{\partial \mathbf{N}_j} \delta \mathbf{N}_j = 0$$

$$\delta \mathbf{N} = \sum_j \delta \mathbf{N}_j = 0$$

$$\delta \mathbf{U} = \sum_j \mathbf{E}_j \delta \mathbf{N}_j = 0$$

Massimizzazione di W_{BE} – 2

- Moltiplicatori di Lagrange:

$$\delta \log W_{BE} - \mathbf{a} \delta \mathbf{N} - \mathbf{b} \delta \mathbf{U} = \sum_j \left(\frac{\partial \log W_{BE}}{\partial N_j} - \mathbf{a} - \mathbf{b} E_j \right) \delta N_j = 0$$

- Che per l'indipendenza dei δN_j diventa:

$$\frac{\partial \log W_{BE}}{\partial N_j} - \mathbf{a} - \mathbf{b} E_j = 0$$

- Quindi: $\log(N_j + g_j - 1) - \log N_j = \mathbf{a} + \mathbf{b} E_j$

$$N_j = \frac{g_j - 1}{e^{a+bE_j} - 1} \approx \frac{g_j}{e^{a+bE_j} - 1} = \frac{g_j}{e^{\frac{E_j - \mu}{kT}} - 1}$$

Passaggio al continuo

- Fermi-Dirac
$$N_j = \frac{g_j}{e^{\frac{E_j - \mu}{kT}} + 1} \quad n(E)dE = \frac{g(E)dE}{e^{\frac{E - \mu}{kT}} + 1}$$
- Bose-Einstein
$$N_j = \frac{g_j}{e^{\frac{E_j - \mu}{kT}} - 1} \quad n(E)dE = \frac{g(E)dE}{e^{\frac{E - \mu}{kT}} - 1}$$
- Maxwell-Boltzmann
$$N_j = g_j e^{-\frac{E_j - \mu}{kT}} \quad n(E)dE = g(E)dE e^{-\frac{E - \mu}{kT}}$$
- La distribuzione FD si applica a fermioni (particelle a spin semi-intero, e.g. elettroni), quella di BE ai bosoni (particelle a spin intero)
- La distribuzione di MB/semiclassica si usa come limite di FD e BE per $E \gg \mu$

Applicazione: gas di fotoni/fononi

- L'applicazione tipica della statistica di BE è ai gas atomici (elio)
- Più in generale si può applicare ad ogni particella (o quasi particella) dotata di spin intero \rightarrow fotone (quanto di radiazione elettromagnetica) e fonone (quanto di vibrazione reticolare in un cristallo)
- In entrambi i casi (fotone/fonone) è necessario introdurre una modifica: sia i fotoni sia i fononi non si conservano, ma possono essere creati o distrutti \rightarrow il vincolo $\delta N=0$ viene meno, quindi $\mu = kT = 0$

Densità di energia nella cavità

- Dalla trattazione di Rayleigh-Jeans, la densità di modi è [m^{-3}]:

$$g(\nu)d\nu = \pi \left(\frac{2}{c} \right)^3 \nu^2 d\nu$$

- L'energia è legata alla frequenza da $E = h\nu$, quindi scriviamo

$$g(E) = g(\nu) \frac{d\nu}{dE} = \frac{\pi}{h^3} \left(\frac{2}{c} \right)^3 E^2$$

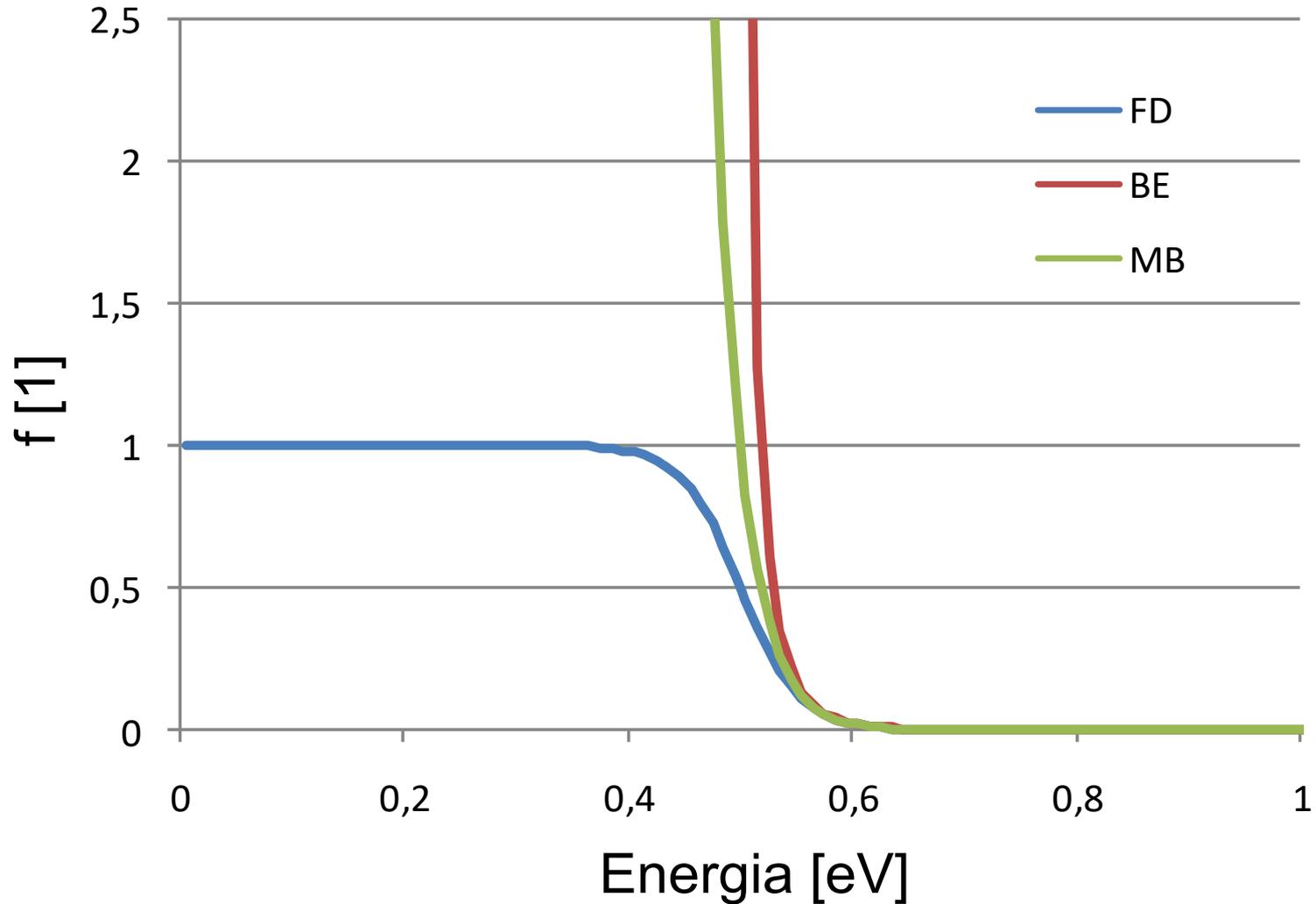
- Allora la densità di fotoni è:

$$n(E) = g(E) f_{BE}(E) = \frac{8\pi E^2}{h^3 c^3} \frac{1}{e^{\frac{E}{kT}} - 1}$$

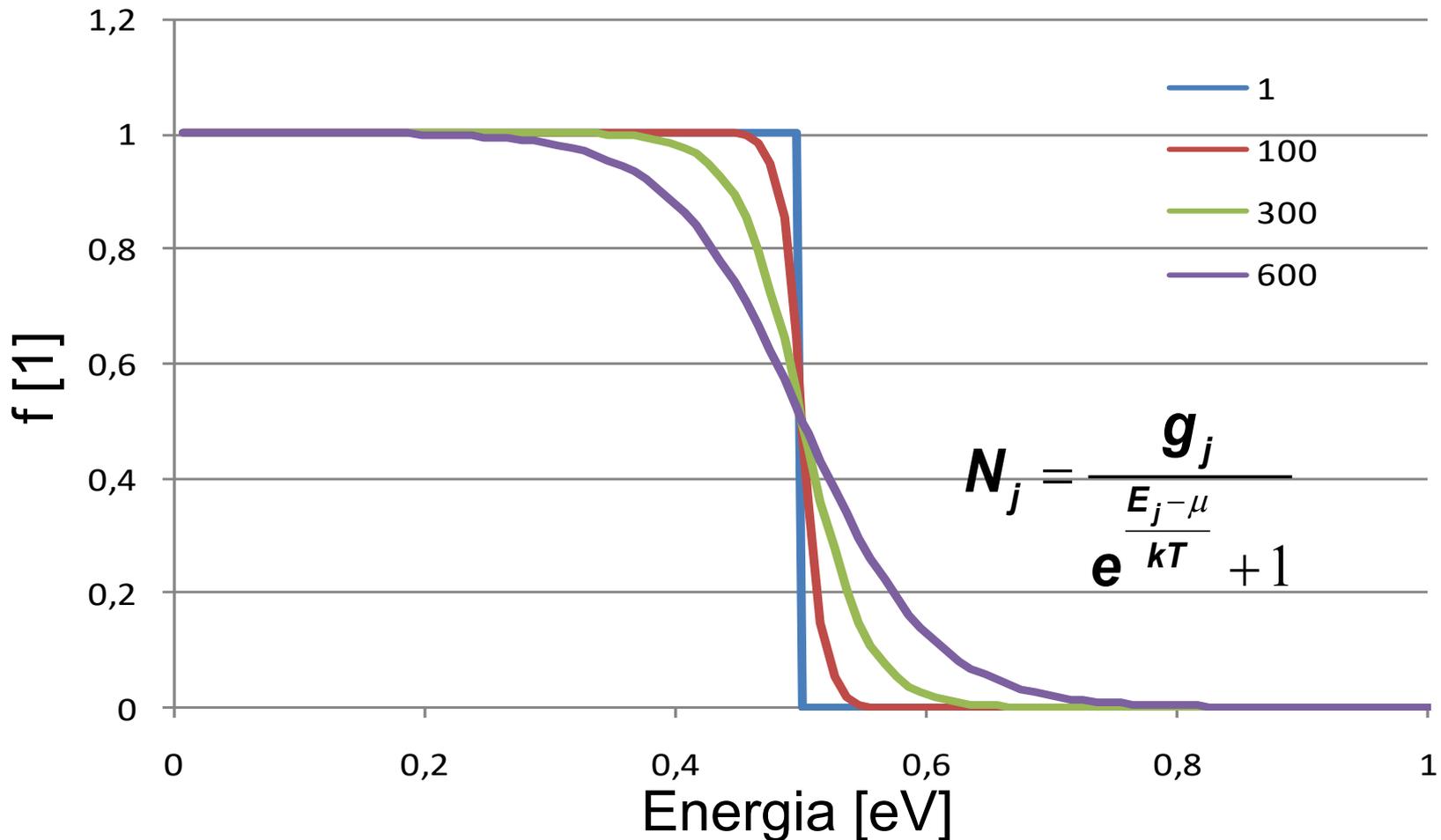
- La densità di energia è:

$$u(E) = E g(E) f_{BE}(E) = \frac{8\pi E^3}{h^3 c^3} \frac{1}{e^{\frac{E}{kT}} - 1}$$

Distribuzioni a confronto



Distribuzione di Fermi



- La curva impiega circa $5kT$ per andare dal 90% al 10% → alle basse temperature è praticamente un gradino

Conclusioni

- La densità di portatori in solidi (metalli o semiconduttori/isolanti) all'equilibrio richiede di conoscere:
 - Densità di stati. In approssimazione parabolica, la densità in 3D cresce con la radice dell'energia. Si adotta un'opportuna massa (DOS).
 - Probabilità di occupazione degli stati → distribuzione statistica di Fermi Dirac

Statistica di Maxwell-Boltzmann – 1

- Particelle distinguibili
- In ogni stato è possibile collocare un numero illimitato di particelle
- In quanti modi posso distribuire N palline in pile da N_j palline ciascuna?
- In quanti modi posso realizzare una pila da N_j palline in g_j stati?
- La prima in g_j modi, la seconda in g_j modi, la terza in g_j modi ...
- Estesa ai vari livelli E_j

$$\frac{N!}{\prod_j N_j!}$$

$$g_j^{N_j}$$

$$\prod_j g_j^{N_j}$$

- Quindi otteniamo

$$W_{MB} = N! \prod_j \frac{g_j^{N_j}}{N_j!}$$

Massimizzazione di $W_{MB} - 1$

- Calcoliamo il logaritmo $\log W_{MB}$:

$$\begin{aligned}\log W_{MB} &\approx N \log N - N + \sum_j N_j \log g_j - \sum_j (N_j \log N_j - N_j) \\ &= \sum_j \left(N_j \log \sum_j N_j + N_j \log g_j - N_j \log N_j \right)\end{aligned}$$

- Moltiplicatori di Lagrange: $\frac{\partial \log W_{MB}}{\partial N_j} - a - bE_j = 0$

$$\frac{\partial \log W_{MB}}{\partial N_j} = \log N + \sum_j \frac{N_j}{N} + \log g_j - \log N_j - 1 = \log \frac{Ng_j}{N_j} = a + bE_j$$

- Quindi: $N_j = Ng_j e^{-a-bE_j} = Ng_j e^{-\frac{E_j - \mu}{kT}}$

Distribuzione semiclassica

- Dalla precedente formula $N_j = Ng_j e^{-\frac{E_j - \mu}{kT}}$ notiamo che il prefattore N deriva dall'aver assunto la distinguibilità delle particelle. Se le avessimo assunte indistinguibili avremmo ottenuto la BE. Se invece correggessimo parzialmente dividendo W_{MB} per $N!$ otterremmo: $N_j = g_j e^{-\frac{E_j - \mu}{kT}}$
- Questa viene definita distribuzione semiclassica (tiene conto parzialmente della indistinguibilità delle particelle) ed è buona approssimazione di FD e BE alle alte energie $E_j \gg \mu$
- Nel seguito confonderemo le due, MB = semiclassica