



Fisica dello Stato Solido

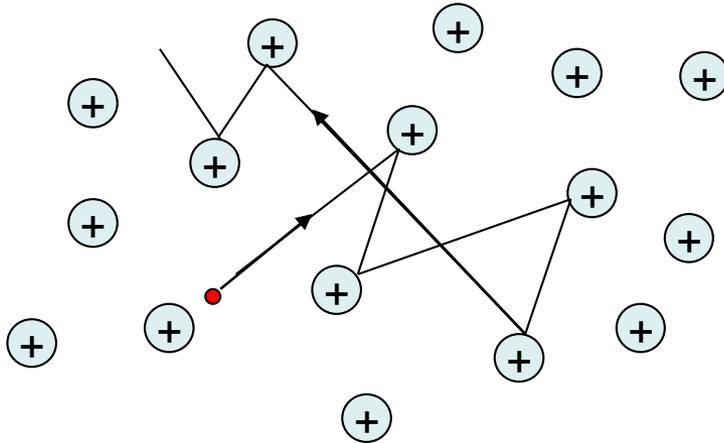
Lezione n.6

Introduzione alla conduzione elettrica nei metalli

Corso di Fisica dei Semiconduttori
Laurea Magistrale in Ingegneria Elettronica
a.a.17-18

<http://www.de.unifi.it/FISICA/Bruzzi/fss.html>

Nell'introduzione al corso abbiamo già parlato del primo modello della conduzione elettrica dovuto a Drude (1900)



L'elettrone di conduzione interagisce con gli ioni mediante collisioni: eventi istantanei che cambiano bruscamente la sua velocità .

Assunzioni del modello:

1. Ioni nel reticolo fissi e disposti casualmente .
2. Nel tempo che intercorre tra collisioni successive si trascurano le interazioni tra ione ed elettrone (approssimazione di elettrone libero) e tra elettrone ed elettrone (approssimazione di elettrone indipendente).
3. La probabilità che l'elettrone non abbia avuto collisione nel tempo t è pari a:

$$P = e^{-\frac{t}{\tau}} \quad \text{con } \tau = \text{tempo medio tra due collisioni successive.}$$

4. La velocità di uscita dalla collisione ha direzione casuale e non correlata alla velocità prima della collisione e modulo correlato con la temperatura locale .

Derivazione della legge di Ohm nel modello di Drude

Si ottiene:

$$\underline{J} = \sigma \underline{E}$$

$$\mu = \left| \frac{e\tau}{m} \right|$$

Con:

$$\underline{J} = -ne \langle \underline{v} \rangle$$

Definiamo conducibilità elettrica del materiale: $\sigma = \frac{ne^2\tau}{m}$ (resistività: $\rho = \frac{1}{\sigma}$)

Drude utilizza la statistica di Maxwell Boltzmann per valutare la velocità termica dell'elettrone:

$$v_{th} = \sqrt{\frac{3K_B T}{m}} = \sqrt{\frac{3 \cdot 1.38 \cdot 10^{-23} \cdot 300}{0.911 \cdot 10^{-30}}} \approx 10^5 \frac{m}{s}$$

Noto che la velocità di deriva è molto più piccola. Ipotizzando un filo di rame ad esempio: $n = 8.49 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ $A = \pi r^2$ $r = 0.1 \text{ cm}$ $I = 100 \text{ mA}$

$$v_{drift} = \frac{J}{ne} = \frac{I}{Ane} = \frac{0.1A}{3.14 \cdot 10^{-2} \cdot 8.49 \cdot 10^{22} \cdot 1.6 \cdot 10^{-19}} = 0.00023 \text{ cm/s}$$

Valutazione del libero cammino medio dell'elettrone di conduzione:

$$l = v_{th} \cdot \tau \sim 10 \text{ \AA}$$

Problemi nel modello di Drude

Il modello non spiega:

1. la grande variabilità della conducibilità elettrica osservata sperimentalmente tra i diversi materiali

Resistività (Ωcm)	Materiale
$\rho < 10^{-3}$	Metalli
$10^{-3} < \rho < 10^5$	Semiconduttori
$\rho > 10^5$	Isolanti

2. Non spiega come certi materiali possano avere valori positivi di R_H
3. Non spiega il diverso comportamento elettrico tra metalli, semiconduttori ed isolanti al variare della temperatura:
 - Metalli. La conducibilità diminuisce con la temperatura.
 - Semiconduttori. Allo zero assoluto non c'è conducibilità elettrica, la conducibilità cresce con la temperatura, la conducibilità è fortemente dipendente dalla presenza di impurezze
 - Isolanti. Conducibilità elettrica trascurabile in un ampio intervallo di temperature.

Una prima correzione al modello di Drude si effettua considerando che gli elettroni seguono la statistica quantistica di Fermi Dirac.

Modello di Sommerfeld

- a. Gli elettroni obbediscono al principio di esclusione di Pauli, perciò devono essere descritti mediante la **statistica quantistica di Fermi-Dirac**.
- b. Gli elettroni di conduzione sono considerati come liberi. **Devono perciò essere descritti con funzioni d'onda $\varphi(\underline{r})$ soluzioni dell'equazione di Schrödinger:**

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \varphi(\underline{r})}{\partial x^2} = \varepsilon \varphi(\underline{r})$$

Soluzione generale dell'equazione: $\varphi(\underline{r}) = Ae^{i\underline{k}\cdot\underline{r}} + Be^{-i\underline{k}\cdot\underline{r}}$

- c. Gli elettroni di conduzione sono confinati dentro il materiale solido cui appartengono. Utilizzando un esempio già visto nelle lezioni precedenti si può considerare per semplicità il materiale come un cubetto macroscopico di lato L. Se gli elettroni sono confinati nel materiale allora le autofunzioni φ si annullano sulle facce del cubo.

Condizioni al contorno di Born Von Karman

Nella descrizione dei fenomeni di trasporto è però conveniente disporre di autofunzioni in forma di onde progressive che descrivono il moto di un elettrone in una direzione determinata.

Queste condizioni si possono ottenere imponendo le **condizioni al contorno periodiche** o di **Born Von Karman**:

$$\varphi(x, y, z) = \varphi(x + L, y, z)$$

condizioni di B-V-K

$$\varphi(x, y, z) = \varphi(x, y + L, z)$$

$$\varphi(x, y, z) = \varphi(x, y, z + L)$$

Applicando le condizioni di B-V-K otteniamo le seguenti regole di quantizzazione del vettore d'onda:

$$\begin{aligned}
 e^{ik_x x} &= e^{ik_x (x+L)} \\
 e^{ik_y y} &= e^{ik_y (y+L)} \\
 e^{ik_z z} &= e^{ik_z (z+L)}
 \end{aligned}
 \Rightarrow e^{ik_x L} = e^{ik_y L} = e^{ik_z L} = 1$$

$$k_x = \frac{2 \pi n_x}{L}; \quad k_y = \frac{2 \pi n_y}{L}; \quad k_z = \frac{2 \pi n_z}{L} \quad \text{con } n_x, n_y, n_z \text{ numeri interi.}$$

I valori permessi di $k_{x,y,z}$ sono perciò multipli di $\frac{2 \pi}{L}$.

Per ogni valore permesso di \underline{k} si ha livello energetico: $\varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$.

Poiché per gli elettroni vale il **principio di esclusione di Pauli** per ottenere la funzione di occupazione di ciascun livello dobbiamo considerare la **distribuzione quantistica di Fermi Dirac**.

$$\Rightarrow \frac{dn(\varepsilon)}{d\varepsilon} = \frac{g(\varepsilon)}{e^{\frac{\varepsilon - \varepsilon_F}{K_B T}} + 1}$$

Valutazione della funzione di degenerazione $g(\varepsilon)$

Nella lezione n. 3 abbiamo calcolato la funzione di degenerazione $g(\varepsilon)$ per un gas ideale in un recipiente chiuso di volume V :

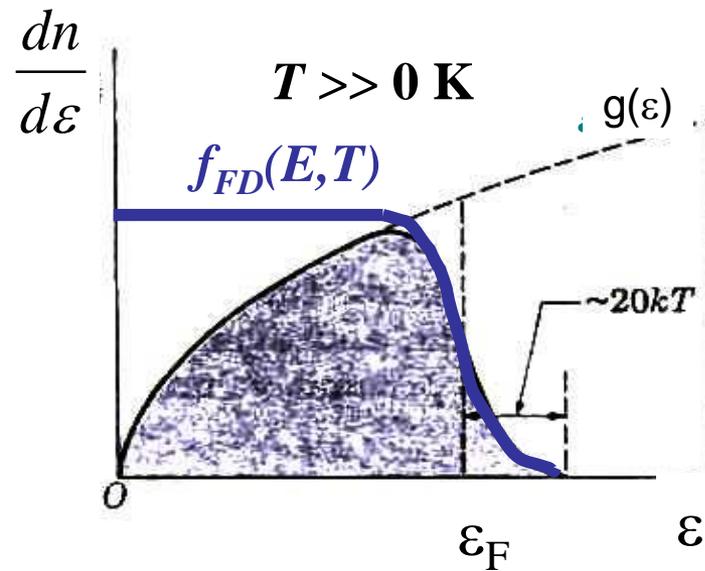
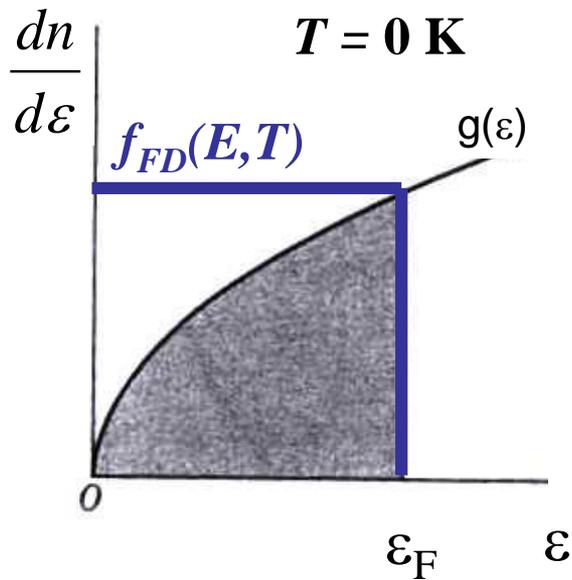
$$g(\varepsilon) = \frac{4\pi V}{h^3} (2m^3)^{1/2} \sqrt{\varepsilon}$$

Numero di valori permessi di energia tra ε ed $\varepsilon + d\varepsilon$

Nel modello di Sommerfeld gli elettroni di conduzione sono trattati come gas di particelle libere, **quindi la funzione di degenerazione è la stessa**, essa viene moltiplicata per 2 perché ogni stato permesso può contenere elettroni con spin up o down:

$$g(\varepsilon) = \frac{8\pi V}{h^3} (2m^3)^{1/2} \sqrt{\varepsilon}$$

$$\rightarrow \frac{dn(\varepsilon)}{d\varepsilon} = g(\varepsilon) f_{FD}(\varepsilon, T) = \frac{g(\varepsilon)}{e^{\frac{\varepsilon - \varepsilon_F}{K_B T}} + 1} = \frac{8\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \frac{\sqrt{\varepsilon}}{e^{\frac{\varepsilon - \varepsilon_F}{K_B T}} + 1}$$



Valutazione di ε_F

l'integrale sull'energia della funzione $dn/d\varepsilon$ è pari al numero totale N di elettroni:

$$N = \int_0^{\infty} \frac{g(\varepsilon) d\varepsilon}{e^{\frac{\varepsilon - \varepsilon_F}{K_B T}} + 1} = \frac{8\pi V \sqrt{2m^3}}{h^3} \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{\varepsilon} d\varepsilon}{e^{\frac{\varepsilon - \varepsilon_F}{K_B T}} + 1}$$

valutato a $T = 0$ K:

$$n = \frac{N}{V} = \frac{8\pi \sqrt{2m^3}}{h^3} \int_0^{\varepsilon_F} \sqrt{\varepsilon} d\varepsilon = \frac{16\pi \sqrt{2m^3}}{3h^3} \varepsilon_F^{3/2}$$

Otteniamo l'energia di Fermi ε_F in funzione della concentrazione di elettroni di conduzione:

$$\varepsilon_F = \frac{h^2}{8m} \left(\frac{3n}{\pi} \right)^{2/3}$$

Definiamo velocità di Fermi: $v_F = \sqrt{\frac{2\varepsilon_F}{m}}$ vettor d'onda di Fermi: $k_F = \sqrt{\frac{2m\varepsilon_F}{\hbar^2}}$
 e temperatura di Fermi: $T_F = E_F/k_B$

Tabella riassuntiva parametri modello di Sommerfeld per i metalli

	n [cm ⁻³]	ε_F [eV]	k_F [cm ⁻¹]	v_F [cm/s]	T_F [K]
Li	4.6 10 ²²	4.7	1.1 10 ⁸	1.3 10 ⁸	5.5 10 ⁴
Na	2.5 10 ²²	3.1	0.9 10 ⁸	1.1 10 ⁸	3.7 10 ⁴
K	1.34 10 ²²	2.1	0.73 10 ⁸	0.85 10 ⁸	2.4 10 ⁴
Cu	8.50 10 ²²	7.0	1.35 10 ⁸	1.56 10 ⁸	8.2 10 ⁴
Ag	5.76 10 ²²	5.5	1.19 10 ⁸	1.38 10 ⁸	6.4 10 ⁴
Au	5.90 10 ²²	5.5	1.20 10 ⁸	1.39 10 ⁸	6.4 10 ⁴

APPLICAZIONI DEL MODELLO DI SOMMERFELD

Il successo di questo modello è notevole perché consente di affrontare almeno in prima approssimazione lo studio delle proprietà elettroniche dei metalli in base alle proprietà ed al comportamento classico dell'elettrone singolo. Vediamo nel seguito alcune significative proprietà dei metalli che possono venire soddisfacentemente interpretate sulla base del modello di Sommerfeld:

1. Libero cammino medio

2. Calore specifico dei solidi

3. Effetto fotoelettrico – emissione termoionica – ddp di contatto

Cammino libero medio nel modello di Sommerfeld

Riprendiamo il concetto di libero cammino medio visto nel modello di Drude. Alla velocità termica nel modello di Sommerfeld bisogna sostituire la velocità di Fermi:

$$v_F = \sqrt{\frac{2\varepsilon_F}{m}}$$

che è maggiore di v_{th} di un fattore: $\sqrt{\frac{2\varepsilon_F}{3K_B T}}$

Si ottiene allora: $l = v_F \cdot \tau \sim 100 \text{ \AA}$

Superiore di un ordine di grandezza al calcolo con modello di Drude, corrisponde ad una maggiore delocalizzazione elettronica.

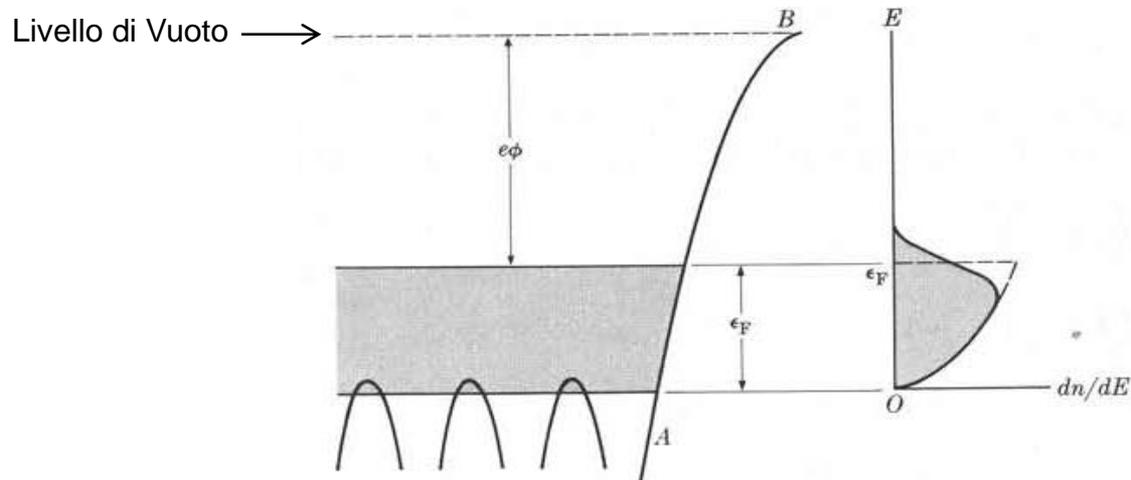
misure su metalli come rame, argento forniscono effettivamente valori di libero cammino medio dell'ordine del centinaio di \AA , in accordo con la teoria di Sommerfeld.

Effetto fotoelettrico

A T basse per estrarre un elettrone dal metallo è necessario fornire all'elettrone almeno l'energia $e\phi$, nell'effetto fotoelettrico questa energia è fornita dal fotone incidente con $h\nu > e\phi$.

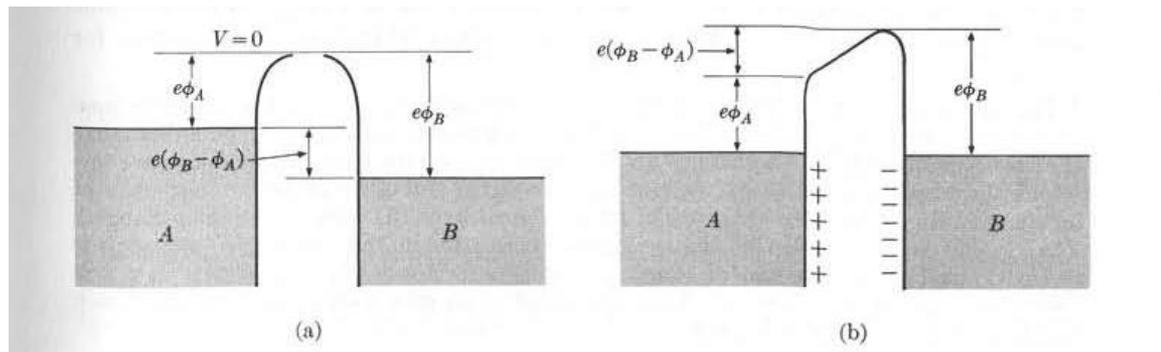
Emissione termoionica

A T elevate l'occupazione degli stati elettronici si estende oltre ϵ_F e una certa percentuale di elettroni potrà avere energia maggiore di $\epsilon_F + e\phi$ e così sfuggire al metallo.



Differenza di potenziale da contatto

Un'altra illustrazione dell'esistenza della energia di Fermi nei metalli è l'instaurarsi di **una differenza di potenziale di contatto** tra due metalli. Supponiamo di avere due metalli A e B non connessi elettricamente (figura (a)). In assenza di un campo esterno l'energia potenziale di un elettrone esterno è zero, i rispettivi livelli di fermi sono alle energie $e\phi_A$ ed $e\phi_B$ (supponiamo $\phi_B > \phi_A$) rispetto a tale valore di riferimento. **Se connettiamo elettricamente i due metalli gli elettroni più energetici da A fluiranno in B riempiendo i livelli sopra il livello di fermi originario di B e svuotando livelli precedentemente occupati in A.** All'equilibrio, A e B avranno l'ultimo livello occupato alla stessa energia rispetto al livello zero, il metallo A risulterà carico positivamente ed il metallo B negativamente: questo comporta l'instaurarsi di una differenza di potenziale pari a $\phi_B - \phi_A$ tra i due metalli (figura b).



Il modello di Sommerfeld descrive abbastanza bene le proprietà elettriche dei metalli (in particolare quelli del I gruppo ed i metalli nobili). Non è però in grado di descrivere le fondamentali differenze tra metalli semiconduttori ed isolanti. Il modello deve essere affinato tenendo conto del potenziale periodico dovuto agli ioni presenti nei siti reticolari → Teoria delle bande.