

# **CAPITOLO 5**

## **EQUAZIONE DI BOLTZMANN PER IL TRASPORTO**

# 5.1 INTRODUZIONE

L'equazione di Boltzmann per il trasporto è basata su un approccio semi-classico, in approssimazione di singolo elettrone.

Il formalismo è molto potente in quanto consente di trattare vari processi di trasporto per gli elettroni in un cristallo soggetti ad un campo elettrico  $\vec{E}$ , un campo magnetico  $\vec{B}$  e un gradiente di temperatura  $\nabla T$ .

A parte l'uso dell'approssimazione singolo elettrone, i presupposti di base sono:

- Le collisioni sono eventi casuali, random
- Le collisioni sono eventi non-correlati tra loro
- La forma della distribuzione degli elettroni di non-equilibrio ha scarso effetto sulla velocità o sulla distribuzione degli elettroni che emergono dalla collisione

Queste ipotesi sono generalmente valide se sono coinvolti campi elettromagnetici deboli e centri di scattering deboli.

Il punto di forza del formalismo di Boltzmann risiede nella sua versatilità nel trattare diversi fenomeni in termini fisici chiari e nell'incorporare parametri realistici del materiale nei calcoli.

## 5.2 FUNZIONE DI DISTRIBUZIONE ELETTRONICA

I fenomeni di trasporto si basano sulla definizione della funzione di distribuzione elettronica  $f(\vec{k}, \vec{r})$  attraverso la relazione:

$$dN = \frac{2}{(2\pi)^3} f(\vec{k}, \vec{r}) d\vec{k} d\vec{r}$$

dove  $dN$  rappresenta il numero di elettroni all'interno del volume infinitesimo  $d\vec{k}d\vec{r}$  nello spazio delle fasi centrato attorno al punto  $(\vec{r}, \vec{k})$ .

Secondo la definizione, se il sistema è all'equilibrio termico, la funzione di distribuzione elettronica coinciderà con la distribuzione di Fermi-Dirac, che dà la probabilità che in un gas di fermioni all'equilibrio termico uno stato di energia  $\mathcal{E}_{\vec{k}}$  sia occupato.

$$f^0(\vec{k}, \vec{r}) = \frac{1}{e^{\frac{\mathcal{E}_{\vec{k}} - \mu}{KT}} + 1}$$

L'obiettivo dello studio dei fenomeni di trasporto è quello di determinare la funzione  $f(\vec{k}, \vec{r}, T, \vec{E}, \vec{B}, t)$  per un sistema perturbato e ottenere quindi le sue proprietà fisiche a partire dalla funzione  $f$ .

## 5.2 FUNZIONE DI DISTRIBUZIONE ELETTRONICA

**Perché è un'approssimazione semiclassica?** Poiché  $f$  è una funzione sia di  $\vec{k}$  che di  $\vec{r}$ , il formalismo di Boltzmann è valido solo in senso semiclassico. Il principio di indeterminazione impedisce una determinazione precisa di  $\vec{k}$  e  $\vec{r}$  di una particella.

Questa funzione di distribuzione è significativa solo se è definita su un  $\overline{d\vec{r}}$  abbastanza grande da contenere abbastanza elettroni per dare una buona rappresentazione dei fenomeni di interesse.

Ad esempio, se  $n$  è la densità degli elettroni, il volume  $|\overline{d\vec{r}}|$  dovrebbe essere significativamente maggiore di  $1/n$ .

D'altra parte,  $|\overline{d\vec{r}}|$  deve essere abbastanza piccolo in modo che le proprietà fisiche del sistema all'interno del piccolo volume non cambino in modo apprezzabile.

Ad esempio, se supponiamo di introdurre perturbazioni oscillanti, se  $\lambda$  è la lunghezza d'onda della perturbazione ( $\vec{E}, \vec{B}$  o  $\nabla T$ ), allora avremo bisogno di  $|\overline{d\vec{r}}| \ll \lambda$ .

Infine, abbiamo bisogno che  $d\vec{k}$  sia tale per cui il principio di indeterminazione per ogni dimensione  $x$  ( $\Delta k_x \Delta x \geq 1$ ) sia soddisfatto.

# 5.2 FUNZIONE DI DISTRIBUZIONE ELETTRONICA

## 5.2.1 Equazione del moto

Il punto di partenza è assumere che una configurazione di equilibrio possa variare nel tempo per due cause:

- per effetto di forze esterne applicate (fenomeni di *drift*)
- per effetto di processi di collisione

Se assumiamo che questi due fenomeni non interferiscono l'uno con l'altro, ovvero sono non correlati, allora possono essere trattati separatamente.

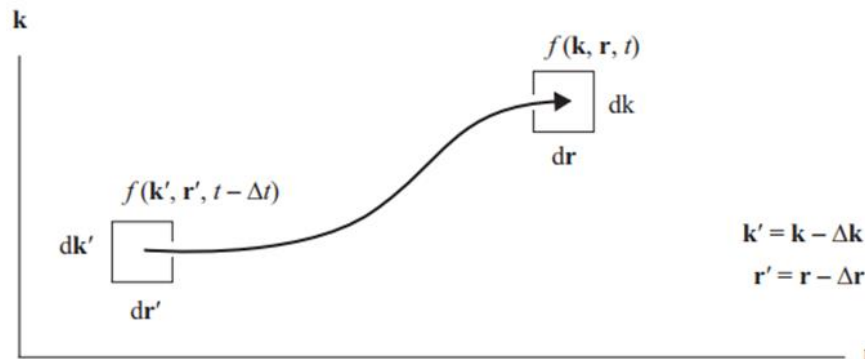
Quindi la variazione temporale della funzione di distribuzione elettronica rispetto ad una condizione di equilibrio può essere scissa in due termini indipendenti:

$$\frac{\partial f(\vec{k}, \vec{r}, t)}{\partial t} = \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{drift} + \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll}$$

Il termine di *drift*  $\left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{drift}$  può essere valutato considerando l'evoluzione temporale di  $f(\vec{k}, \vec{r}, t)$  nello spazio delle fasi.

# 5.2 FUNZIONE DI DISTRIBUZIONE ELETTRONICA

## 5.2.1 Equazione del moto



Consideriamo un volumetto  $d\vec{k}'d\vec{r}'$  centrato su  $(\vec{k}', \vec{r}')$ .

Questo volumetto evolverà nel tempo  $\Delta t$  nel volumetto  $d\vec{k}d\vec{r}$  centrato su  $(\vec{k}, \vec{r})$ , dove  $\vec{k} = \vec{k}' + \Delta\vec{k}$  e  $\vec{r} = \vec{r}' + \Delta\vec{r}$ .

Ricordando la definizione della funzione di distribuzione elettronica, la distribuzione di particelle nell'intorno di  $(\vec{k}', \vec{r}')$  al tempo  $t' = t - \Delta t$  si muoverà verso  $(\vec{k}, \vec{r})$  al tempo  $t$ . Quindi:

$$dN = \frac{2}{(2\pi)^3} f(\vec{k}, \vec{r}) d\vec{k}d\vec{r}$$

$$f(\vec{k}, \vec{r}, t) d\vec{k}d\vec{r} = f(\vec{k}', \vec{r}', t - \Delta t) d\vec{k}'d\vec{r}'$$

# 5.2 FUNZIONE DI DISTRIBUZIONE ELETTRONICA

## 5.2.1 Equazione del moto

Se assumiamo piccole perturbazioni al sistema, possiamo espandere la funzione di distribuzione in Serie di Taylor al primo ordine rispetto a  $\overline{\Delta k}$ ,  $\overline{\Delta r}$  e  $\Delta t$ :

$$f(\vec{k}, \vec{r}, t) d\vec{k} d\vec{r} = f(\vec{k}', \vec{r}', t - \Delta t) d\vec{k}' d\vec{r}'$$

$$f(\vec{k}', \vec{r}', t - \Delta t) \approx f(\vec{k}, \vec{r}, t) - \nabla_{\vec{k}} f(\vec{k}, \vec{r}, t) \cdot \overline{\Delta k} - \nabla_{\vec{r}} f(\vec{k}, \vec{r}, t) \cdot \overline{\Delta r} - \frac{\partial f}{\partial t} \cdot \Delta t$$

Secondo il Teorema di Liouville:

$$d\vec{k}' d\vec{r}' = d\vec{k} d\vec{r}$$

Il Teorema di Liouville afferma che gli stati di un sistema occupano, nello spazio delle fasi, volumi sempre uguali, anche se eventualmente distorti a seguito delle curve percorse dai singoli punti.

Sostituendo queste ultime due espressioni nell'equazione:

$$f(\vec{k}, \vec{r}, t) d\vec{k} d\vec{r} = f(\vec{k}', \vec{r}', t - \Delta t) d\vec{k}' d\vec{r}' \text{ si ottiene:}$$

$$f(\vec{k}, \vec{r}, t) = f(\vec{k}, \vec{r}, t) - \nabla_{\vec{k}} f(\vec{k}, \vec{r}, t) \cdot \overline{\Delta k} - \nabla_{\vec{r}} f(\vec{k}, \vec{r}, t) \cdot \overline{\Delta r} - \frac{\partial f}{\partial t} \cdot \Delta t$$

# 5.2 FUNZIONE DI DISTRIBUZIONE ELETTRONICA

## 5.2.1 Equazione del moto

$$f(\vec{k}, \vec{r}, t) = f(\vec{k}, \vec{r}, t) - \nabla_{\vec{k}} f(\vec{k}, \vec{r}, t) \cdot \overline{\Delta \vec{k}} - \nabla_{\vec{r}} f(\vec{k}, \vec{r}, t) \cdot \overline{\Delta \vec{r}} - \frac{\partial f}{\partial t} \cdot \Delta t$$

da cui: 
$$\frac{\partial f}{\partial t} \cdot \Delta t = -\nabla_{\vec{k}} f(\vec{k}, \vec{r}, t) \cdot \overline{\Delta \vec{k}} - \nabla_{\vec{r}} f(\vec{k}, \vec{r}, t) \cdot \overline{\Delta \vec{r}}$$

Si ottiene quindi un'espressione per  $\frac{\partial f}{\partial t}$  che può essere identificato come la variazione temporale dovuta a fenomeni di drift, quindi:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{drift} \cdot \Delta t = -\nabla_{\vec{k}} f(\vec{k}, \vec{r}, t) \cdot \overline{\Delta \vec{k}} - \nabla_{\vec{r}} f(\vec{k}, \vec{r}, t) \cdot \overline{\Delta \vec{r}}$$

Poiché sappiamo che in approssimazione di singolo-elettrone la forza agente sull'elettrone è pari a:

$$\vec{F} = \hbar \frac{d\vec{k}}{dt}$$

e che la velocità è  $\vec{v} = \frac{d\vec{r}}{dt}$ , se assumiamo che la forza è di origine elettromagnetica, l'equazione precedente diventa:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{drift} = - \left[ \nabla_{\vec{k}} f(\vec{k}, \vec{r}, t) \cdot \frac{e}{\hbar} \left( \vec{E} + \frac{\vec{v}}{c} \times \vec{B} \right) + \nabla_{\vec{r}} f(\vec{k}, \vec{r}, t) \cdot \vec{v} \right]$$



# 5.2 FUNZIONE DI DISTRIBUZIONE ELETTRONICA

## 5.2.1 Equazione del moto

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{drift} = - \left[ \nabla_{\vec{k}} f(\vec{k}, \vec{r}, t) \cdot \frac{e}{\hbar} \left( \vec{E} + \frac{\vec{v}}{c} \times \vec{B} \right) + \nabla_{\vec{r}} f(\vec{k}, \vec{r}, t) \cdot \vec{v} \right]$$

dove  $\vec{E}$  è il campo elettrico e  $\vec{B}$  quello magnetico, entrambi applicati dall'esterno.

Il primo termine deriva da variazioni indotte da campi esterni, mentre il secondo è chiaramente un termine diffusivo.

Il termine di collisioni  $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll}$  descrive le variazioni di  $f(\vec{k}, \vec{r}, t)$  dovute ai processi di collisioni.

$$\frac{\partial f(\vec{k}, \vec{r}, t)}{\partial t} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{drift} + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll}$$

Se indichiamo con  $W_{\vec{k}'\vec{k}}$  la probabilità per unità di tempo per un elettrone nello stato  $\vec{k}'$  di passare nello stato  $\vec{k}$ , allora:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} = \int d\vec{k}' \left\{ W_{\vec{k}'\vec{k}} \left[ f(\vec{k}', \vec{r}) \left( 1 - f(\vec{k}, \vec{r}) \right) \right] - W_{\vec{k}\vec{k}'} \left[ f(\vec{k}, \vec{r}) \left( 1 - f(\vec{k}', \vec{r}) \right) \right] \right\}$$

# 5.2 FUNZIONE DI DISTRIBUZIONE ELETTRONICA

## 5.2.1 Equazione del moto

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} = \int d\vec{k}' \left\{ W_{\vec{k}'\vec{k}} \left[ f(\vec{k}', \vec{r}) (1 - f(\vec{k}, \vec{r})) \right] - W_{\vec{k}\vec{k}'} \left[ f(\vec{k}, \vec{r}) (1 - f(\vec{k}', \vec{r})) \right] \right\}$$

Poiché il processo può essere reversibile:

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

In aggiunta, se assumiamo che i centri di scattering sono distribuiti uniformemente, allora  $W_{\vec{k}'\vec{k}}$  è indipendente da  $\vec{r}$ , allora l'equazione precedente si semplifica:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} = \int d\vec{k}' W_{\vec{k}'\vec{k}} \left[ f(\vec{k}', \vec{r}) - f(\vec{k}, \vec{r}) \right]$$

Inserendo il contributo di deriva e quello collisionale nella variazione temporale della funzione di distribuzione elettronica si ottiene l'equazione di Boltzmann del trasporto:

$$\frac{\partial f(\vec{k}, \vec{r}, t)}{\partial t} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{drift} + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll}$$

$$\frac{\partial f(\vec{k}, \vec{r}, t)}{\partial t} = - \left[ \nabla_{\vec{k}} f(\vec{k}, \vec{r}, t) \cdot \frac{e}{\hbar} \left( \vec{E} + \frac{\vec{v}}{c} \times \vec{B} \right) + \nabla_{\vec{r}} f(\vec{k}, \vec{r}, t) \cdot \vec{v} \right] + \int d\vec{k}' W_{\vec{k}'\vec{k}} \left[ f(\vec{k}', \vec{r}) - f(\vec{k}, \vec{r}) \right]$$

# 5.2 FUNZIONE DI DISTRIBUZIONE ELETTRONICA

## 5.2.1 Equazione del moto

$$\frac{\partial f(\vec{k}, \vec{r}, t)}{\partial t} = - \left[ \nabla_{\vec{k}} f(\vec{k}, \vec{r}, t) \cdot \frac{e}{\hbar} \left( \vec{E} + \frac{\vec{v}}{c} \times \vec{B} \right) + \nabla_{\vec{r}} f(\vec{k}, \vec{r}, t) \cdot \vec{v} \right] + \int d\vec{k}' W_{\vec{k}'\vec{k}} \left[ f(\vec{k}', \vec{r}) - f(\vec{k}, \vec{r}) \right]$$

È un'equazione integrale-differenziale, difficile da risolvere.

Però, se si riesce ad ottenere la soluzione  $f(\vec{k}, \vec{r}, t)$ , si possono determinare molte proprietà di trasporto dei solidi.

Ad esempio, la densità di corrente elettronica  $\vec{j}(\vec{r}, t)$  è definita come il numero di portatori che attraversano un'area unitaria per unità di tempo, ovvero:

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = e\vec{v}(\vec{k})dN = \frac{2e}{(2\pi)^3} \int d\vec{k} \vec{v}(\vec{k}) f(\vec{k}, \vec{r}, t) \quad dN = \frac{2}{(2\pi)^3} f(\vec{k}, \vec{r}) d\vec{k} d\vec{r}$$

Per i cristalli occorre estendere il formalismo per includere gli effetti di una struttura a bande.

Quindi, la funzione di distribuzione elettronica è generalizzata con una  $f_n(\vec{k}, \vec{r}, t)$ , con  $n$  indice di banda,  $W_{\vec{k}'\vec{k}}$  con una  $W^{nn'}_{\vec{k}'\vec{k}}$  che tiene conto degli scattering interbanda e  $\vec{v}(\vec{k})$  con  $\vec{v}_n(\vec{k})$ .

# 5.2 FUNZIONE DI DISTRIBUZIONE ELETTRONICA

## 5.2.2 Trasporto in condizioni stazionarie

In molti esperimenti e condizioni, si è interessati a studiare le proprietà del sistema in condizioni stazionarie.

Nel formalismo del trasporto di Boltzmann, in condizioni stazionarie la  $f(\vec{k}, \vec{r}, t)$  deve soddisfare la condizione:

$$\frac{\partial f(\vec{k}, \vec{r}, t)}{\partial t} = 0 = \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{drift} + \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll}$$

che ci dice che i processi di deriva devono bilanciare i processi di collisione, in regime stazionario.

Utilizzando le espressioni prima trovate, la condizione di stazionarietà diventa:

$$\frac{\partial f(\vec{k}, \vec{r}, t)}{\partial t} = - \left[ \nabla_{\vec{k}} f(\vec{k}, \vec{r}, t) \cdot \frac{e}{\hbar} \left( \vec{E} + \frac{\vec{v}}{c} \times \vec{B} \right) + \nabla_{\vec{r}} f(\vec{k}, \vec{r}, t) \cdot \vec{v} \right] + \int d\vec{k}' W_{\vec{k}'\vec{k}} [f(\vec{k}', \vec{r}) - f(\vec{k}, \vec{r})]$$

$$\left[ \vec{v}(\vec{k}) \cdot \nabla_{\vec{r}} + \frac{e}{\hbar} \left( \vec{E} + \frac{\vec{v}(\vec{k})}{c} \times \vec{B} \right) \cdot \nabla_{\vec{k}} \right] f(\vec{k}, \vec{r}, t) = \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll}$$

# 5.2 FUNZIONE DI DISTRIBUZIONE ELETTRONICA

## 5.2.2 Trasporto in condizioni stazionarie

$$\left[ \vec{v}(\vec{k}) \cdot \nabla_{\vec{r}} + \frac{e}{\hbar} \left( \vec{E} + \frac{\vec{v}(\vec{k})}{c} \times \vec{B} \right) \cdot \nabla_{\vec{k}} \right] f(\vec{k}, \vec{r}, t) = \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll}$$

Questa è l'equazione che andrebbe risolta per determinare l'espressione di  $f(\vec{k}, \vec{r}, t)$  in regime di trasporto stazionario. I parametri specifici del cristallo sono  $\vec{v}(\vec{k})$  e  $\left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll}$ .

Consideriamo il caso più semplice, un cristallo spazialmente omogeneo (densità di difetti e di impurezze uniforme) all'equilibrio termico con  $\vec{B} = 0$ ,  $\vec{E} = 0$  e  $\nabla T = 0$ .

Ne segue immediatamente che entrambi gli addendi del primo termine sono nulli, che  $f(\vec{k}, \vec{r}, t)$  coinciderà con la funzione di Fermi-Dirac  $f^0(\vec{k}, \vec{r})$ , e che quindi  $\left( \frac{\partial f^0}{\partial t} \right)_{coll} = 0$ .

Usando l'espressione trovata prima:

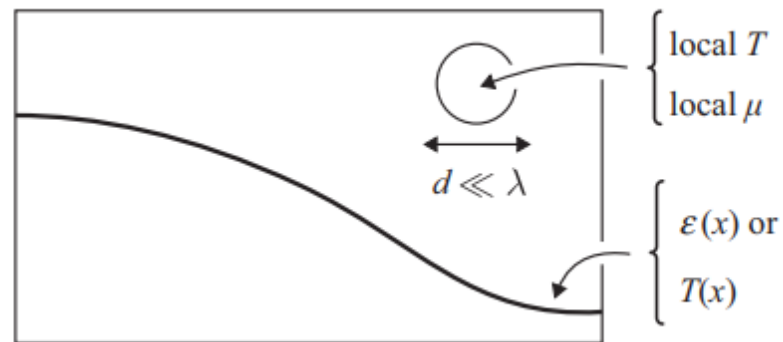
$$\left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} = \int d\vec{k}' W_{\vec{k}'\vec{k}} \left[ f(\vec{k}', \vec{r}) - f(\vec{k}, \vec{r}) \right]$$

$$\left( \frac{\partial f^0}{\partial t} \right)_{coll} = \int d\vec{k}' W_{\vec{k}'\vec{k}} \left[ f^0(\vec{k}', \vec{r}) - f^0(\vec{k}, \vec{r}) \right] = 0$$

# 5.2 FUNZIONE DI DISTRIBUZIONE ELETTRONICA

## 5.2.2 Trasporto in condizioni stazionarie

Assieme al concetto di perturbazione, definiamo il concetto di equilibrio locale.



Per perturbazioni che variano lentamente con lunghezza di variazione  $\lambda$ , è utile definire una temperatura locale  $T(\vec{r})$  e un potenziale chimico locale  $\mu(\vec{r})$  in una regione di dimensione  $d$ , con  $d \ll \lambda$ , sebbene ci possa essere una variazione complessiva di  $T$  e  $\mu$  sull'intero campione.

Localmente, nella regione centrata su  $\vec{r}$ , possiamo esprimere la funzione di distribuzione elettronica come somma di due contributi:

$$f = f^0 + f^{(1)}$$

# 5.2 FUNZIONE DI DISTRIBUZIONE ELETTRONICA

## 5.2.2 Trasporto in condizioni stazionarie

$$f = f^0 + f^{(1)}$$

dove  $f^0$  è il contributo all'equilibrio, quindi:

$$f^0(\vec{k}, \vec{r}) = \frac{1}{\frac{\varepsilon_{\vec{k}} - \mu(\vec{r})}{e^{KT(\vec{r})} + 1}}$$

con la condizione che:

$$\left(\frac{\partial f^0}{\partial t}\right)_{coll} = 0$$

Quindi, poiché  $\left(\frac{\partial f^0}{\partial t}\right)_{coll}$  non dà contributo, possiamo focalizzare l'attenzione sul termine perturbativo  $f^{(1)}$ .

# 5.2 FUNZIONE DI DISTRIBUZIONE ELETTRONICA

## 5.2.2 Trasporto in condizioni stazionarie

Inseriamo l'espressione  $f = f^0 + f^{(1)}$  nell'equazione di Boltzmann in condizioni stazionarie:

$$\left[ \vec{v}(\vec{k}) \cdot \nabla_{\vec{r}} + \frac{e}{\hbar} \left( \vec{E} + \frac{\vec{v}(\vec{k})}{c} \times \vec{B} \right) \cdot \nabla_{\vec{k}} \right] f(\vec{k}, \vec{r}, t) = \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll}$$

$$\left[ \vec{v}(\vec{k}) \cdot \nabla_{\vec{r}} + \frac{e}{\hbar} \left( \vec{E} + \frac{\vec{v}(\vec{k})}{c} \times \vec{B} \right) \cdot \nabla_{\vec{k}} \right] [f^0 + f^{(1)}] = \left( \frac{\partial f^{(1)}}{\partial t} \right)_{coll}$$

Sviluppando le derivate:

$$\begin{aligned} & \vec{v}(\vec{k}) \cdot \nabla_{\vec{r}} f^0 + \vec{v}(\vec{k}) \cdot \nabla_{\vec{r}} f^{(1)} + \frac{e}{\hbar} \left( \vec{E} + \frac{\vec{v}(\vec{k})}{c} \times \vec{B} \right) \cdot \nabla_{\vec{k}} f^0 \\ & + \frac{e}{\hbar} \left( \vec{E} + \frac{\vec{v}(\vec{k})}{c} \times \vec{B} \right) \cdot \nabla_{\vec{k}} f^{(1)} = \left( \frac{\partial f^{(1)}}{\partial t} \right)_{coll} \end{aligned}$$



# 5.2 FUNZIONE DI DISTRIBUZIONE ELETTRONICA

## 5.2.2 Trasporto in condizioni stazionarie

$$\vec{v}(\vec{k}) \cdot \nabla_{\vec{r}} f^0 + \vec{v}(\vec{k}) \cdot \nabla_{\vec{r}} f^{(1)} + \frac{e}{\hbar} \left( \vec{E} + \frac{\vec{v}(\vec{k})}{c} \times \vec{B} \right) \cdot \nabla_{\vec{k}} f^0 + \frac{e}{\hbar} \left( \vec{E} + \frac{\vec{v}(\vec{k})}{c} \times \vec{B} \right) \cdot \nabla_{\vec{k}} f^{(1)} = \left( \frac{\partial f^{(1)}}{\partial t} \right)_{coll}$$

Per linearizzare quest'equazione occorre fare due approssimazioni:

1. Supponiamo che i fenomeni elettrici siano più grandi di quelli magnetici, allora nel terzo addendo si può trascurare  $\frac{\vec{v}(\vec{k})}{c} \times \vec{B}$  e quindi

$$\frac{e}{\hbar} \left( \vec{E} + \frac{\vec{v}(\vec{k})}{c} \times \vec{B} \right) \cdot \nabla_{\vec{k}} f^0 \approx \frac{e}{\hbar} \vec{E} \cdot \nabla_{\vec{k}} f^0$$

2. Nel quarto addendo, assumendo che

$$\vec{E} \cdot \nabla_{\vec{k}} f^{(1)} \ll \vec{E} \cdot \nabla_{\vec{k}} f^0$$

Si ha:

$$\frac{e}{\hbar} \left( \vec{E} + \frac{\vec{v}(\vec{k})}{c} \times \vec{B} \right) \cdot \nabla_{\vec{k}} f^{(1)} \approx \frac{e}{\hbar} \left( \frac{\vec{v}(\vec{k})}{c} \times \vec{B} \right) \cdot \nabla_{\vec{k}} f^{(1)}$$

# 5.2 FUNZIONE DI DISTRIBUZIONE ELETTRONICA

## 5.2.2 Trasporto in condizioni stazionarie

$$\vec{v}(\vec{k}) \cdot \nabla_{\vec{r}} f^0 + \vec{v}(\vec{k}) \cdot \nabla_{\vec{r}} f^{(1)} + \frac{e}{\hbar} \left( \vec{E} + \frac{\vec{v}(\vec{k})}{c} \times \vec{B} \right) \cdot \nabla_{\vec{k}} f^0 + \frac{e}{\hbar} \left( \vec{E} + \frac{\vec{v}(\vec{k})}{c} \times \vec{B} \right) \cdot \nabla_{\vec{k}} f^{(1)} = \left( \frac{\partial f^{(1)}}{\partial t} \right)_{coll}$$

Con queste due approssimazioni, si ottiene l'equazione di Boltzmann linearizzata:

$$\vec{v}(\vec{k}) \cdot \nabla_{\vec{r}} f^0 + \vec{v}(\vec{k}) \cdot \nabla_{\vec{r}} f^{(1)} + \frac{e}{\hbar} \vec{E} \cdot \nabla_{\vec{k}} f^0 = \left( \frac{\partial f^{(1)}}{\partial t} \right)_{coll} - \frac{e}{\hbar} \left( \frac{\vec{v}(\vec{k})}{c} \times \vec{B} \right) \cdot \nabla_{\vec{k}} f^{(1)}$$

In aggiunta, se assumiamo che le variazioni spaziali di  $f^0$  sono più grandi rispetto a quelle di  $f^{(1)}$ , possiamo imporre che:

$$\vec{v}(\vec{k}) \cdot \nabla_{\vec{r}} f^0 \gg \vec{v}(\vec{k}) \cdot \nabla_{\vec{r}} f^{(1)}$$

e l'equazione di Boltzmann linearizzata si semplifica ulteriormente:

$$\vec{v}(\vec{k}) \cdot \nabla_{\vec{r}} f^0 + \frac{e}{\hbar} \vec{E} \cdot \nabla_{\vec{k}} f^0 = \left( \frac{\partial f^{(1)}}{\partial t} \right)_{coll} - \frac{e}{\hbar} \left( \frac{\vec{v}(\vec{k})}{c} \times \vec{B} \right) \cdot \nabla_{\vec{k}} f^{(1)}$$

Ma anche quest'equazione è difficile da risolvere.

# 5.2 FUNZIONE DI DISTRIBUZIONE ELETTRONICA

## 5.2.3 Approssimazione con il tempo di rilassamento

Il termine di collisione è quello più difficile da stimare.

Facciamo delle approssimazioni a partire da delle considerazioni:

1.  $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll}$  ha le dimensioni di  $\frac{[f]}{s}$
2. Approcciandoci all'equilibrio termico,  $f \rightarrow f^0$  perché  $f^{(1)} \rightarrow 0$ , che comporta  $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} \rightarrow 0$

Quindi l'approssimazione più semplice che possiamo fare è considerare  $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll}$  proporzionale a  $f^{(1)}$  fratto un certo tempo caratteristico di collisione  $\tau_{\vec{k}}$ .

In aggiunta, se supponiamo di essere ancora in approssimazione di densità uniforme di centri collisionali, allora  $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll}$  deve essere indipendente da  $\vec{r}$ .

In definitiva, l'approssimazione tempo di rilassamento esprime:

$$\left(\frac{\partial f(\vec{k}, \vec{r})}{\partial t}\right)_{coll} = -\frac{f^{(1)}}{\tau_{\vec{k}}}$$

# 5.2 FUNZIONE DI DISTRIBUZIONE ELETTRONICA

## 5.2.3 Approssimazione con il tempo di rilassamento

$$\left( \frac{\partial f(\vec{k}, \vec{r})}{\partial t} \right)_{coll} = - \frac{f^{(1)}}{\tau_{\vec{k}}}$$

Il segno meno nasce dalla convenzione che, essendo  $f^{(1)} = f - f^0$ , si vuole soddisfatta la condizione che rimuovendo la perturbazione il sistema deve tornare all'equilibrio, ovvero a  $f^0$ .

$\tau_{\vec{k}}$  è noto come tempo di rilassamento.

In assenza di campi esterni, se  $f$  viene deviata dal suo valore di equilibrio, allora ricordando che i termini di deriva sono nulli, si ha:

$$\frac{\partial f(\vec{k}, \vec{r}, t)}{\partial t} = \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{drift} + \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} = - \frac{f^{(1)}}{\tau_{\vec{k}}}$$

che ha come soluzione:

$$f^{(1)}(\vec{k}, t) = A e^{-\frac{t}{\tau_{\vec{k}}}}$$

# 5.2 FUNZIONE DI DISTRIBUZIONE ELETTRONICA

## 5.2.3 Approssimazione con il tempo di rilassamento

$$f^{(1)}(\vec{k}, t) = A e^{-\frac{t}{\tau_{\vec{k}}}}$$

ovvero:

$$f = f^0 + f^{(1)}$$

$$f(\vec{k}, t) = f^0(\vec{k}) + A e^{-\frac{t}{\tau_{\vec{k}}}}$$

La funzione di distribuzione ritorna al suo valore di equilibrio in un tempo dell'ordine di  $\tau_{\vec{k}}$ .

Quindi  $\tau_{\vec{k}}$  stabilisce il tempo caratteristico per un sistema perturbato di tornare all'equilibrio subito dopo aver rimosso la perturbazione.

E con l'aggiunta di campi esterni?

Riprendiamo l'equazione di Boltzmann linearizzata:

$$\vec{v}(\vec{k}) \cdot \nabla_{\vec{r}} f^0 + \frac{e}{\hbar} \vec{E} \cdot \nabla_{\vec{k}} f^0 = \left( \frac{\partial f^{(1)}}{\partial t} \right)_{coll} - \frac{e}{\hbar} \left( \frac{\vec{v}(\vec{k})}{c} \times \vec{B} \right) \cdot \nabla_{\vec{k}} f^{(1)}$$

# 5.2 FUNZIONE DI DISTRIBUZIONE ELETTRONICA

## 5.2.3 Approssimazione con il tempo di rilassamento

$$\vec{v}(\vec{k}) \cdot \nabla_{\vec{r}} f^0 + \frac{e}{\hbar} \vec{E} \cdot \nabla_{\vec{k}} f^0 = \left( \frac{\partial f^{(1)}}{\partial t} \right)_{coll} - \frac{e}{\hbar} \left( \frac{\vec{v}(\vec{k})}{c} \times \vec{B} \right) \cdot \nabla_{\vec{k}} f^{(1)}$$

Semplifichiamola introducendo le approssimazioni fatte sinora.

La  $f^0$  è la funzione di Fermi-Dirac locale:

$$f^0(\vec{k}, \vec{r}) = \frac{1}{e^{\frac{\epsilon_{\vec{k}} - \mu(\vec{r})}{KT(\vec{r})}} + 1} = \frac{1}{e^{\beta(\vec{r})[\epsilon_{\vec{k}} - \mu(\vec{r})]} + 1} \quad \text{con } \beta(\vec{r}) = \frac{1}{KT(\vec{r})}$$

Calcoliamo il primo addendo  $\nabla_{\vec{r}} f^0$

Poiché la quantità dipendente da  $\vec{r}$  è l'esponente  $\beta(\vec{r})[\epsilon_{\vec{k}} - \mu(\vec{r})]$ , allora possiamo scrivere la derivata come:

$$\nabla_{\vec{r}} f^0 = \frac{\partial f^0}{\partial [\beta(\epsilon - \mu)]} \nabla_{\vec{r}} [\beta(\epsilon_{\vec{k}} - \mu(\vec{r}))]$$

# 5.2 FUNZIONE DI DISTRIBUZIONE ELETTRONICA

## 5.2.3 Approssimazione con il tempo di rilassamento

$$\vec{v}(\vec{k}) \cdot \nabla_{\vec{r}} f^0 + \frac{e}{\hbar} \vec{E} \cdot \nabla_{\vec{k}} f^0 = \left( \frac{\partial f^{(1)}}{\partial t} \right)_{coll} - \frac{e}{\hbar} \left( \frac{\vec{v}(\vec{k})}{c} \times \vec{B} \right) \cdot \nabla_{\vec{k}} f^{(1)}$$

$$\nabla_{\vec{r}} f^0 = \frac{\partial f^0}{\partial [\beta(\mathcal{E} - \mu)]} \nabla_{\vec{r}} [\beta(\mathcal{E}_{\vec{k}} - \mu(\vec{r}))]$$

Consideriamo la prima derivata.

Poiché  $f^0$  è fortemente dipendente dai livelli energetici  $\mathcal{E}$  e poco da  $\vec{r}$ , allora possiamo assumere  $\beta$  e  $\mu$  costanti nell'operazione di derivazione, e quindi:

$$\frac{\partial f^0}{\partial [\beta(\mathcal{E} - \mu)]} \approx \frac{1}{\beta} \frac{\partial f^0}{\partial \mathcal{E}}$$

Sostituendo:

$$\nabla_{\vec{r}} f^0 \approx \frac{1}{\beta} \frac{\partial f^0}{\partial \mathcal{E}} \nabla_{\vec{r}} [\beta(\mathcal{E}_{\vec{k}} - \mu(\vec{r}))]$$

# 5.2 FUNZIONE DI DISTRIBUZIONE ELETTRONICA

## 5.2.3 Approssimazione con il tempo di rilassamento

$$\vec{v}(\vec{k}) \cdot \nabla_{\vec{r}} f^0 + \frac{e}{\hbar} \vec{E} \cdot \nabla_{\vec{k}} f^0 = \left( \frac{\partial f^{(1)}}{\partial t} \right)_{coll} - \frac{e}{\hbar} \left( \frac{\vec{v}(\vec{k})}{c} \times \vec{B} \right) \cdot \nabla_{\vec{k}} f^{(1)}$$

$$\nabla_{\vec{r}} f^0 \approx \frac{1}{\beta} \frac{\partial f^0}{\partial \mathcal{E}} \nabla_{\vec{r}} [\beta(\mathcal{E}_{\vec{k}} - \mu(\vec{r}))]$$

Quindi il primo addendo diventa:

$$\vec{v}(\vec{k}) \cdot \nabla_{\vec{r}} f^0 = \frac{1}{\beta} \frac{\partial f^0}{\partial \mathcal{E}} \vec{v}(\vec{k}) \cdot \nabla_{\vec{r}} [\beta(\mathcal{E}_{\vec{k}} - \mu(\vec{r}))]$$

Analogamente procediamo con il secondo addendo:

$$\frac{e}{\hbar} \vec{E} \cdot \nabla_{\vec{k}} f^0 = \frac{e}{\hbar} \vec{E} \cdot \frac{\partial f^0}{\partial \mathcal{E}} \nabla_{\vec{k}} \mathcal{E}$$

Ricordando che:  $\vec{v}(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} \mathcal{E}$

$$\frac{e}{\hbar} \vec{E} \cdot \nabla_{\vec{k}} f^0 = e \vec{E} \cdot \vec{v}(\vec{k}) \left( \frac{\partial f^0}{\partial \mathcal{E}} \right)$$



# 5.2 FUNZIONE DI DISTRIBUZIONE ELETTRONICA

## 5.2.3 Approssimazione con il tempo di rilassamento

$$\vec{v}(\vec{k}) \cdot \nabla_{\vec{r}} f^0 + \frac{e}{\hbar} \vec{E} \cdot \nabla_{\vec{k}} f^0 = \left( \frac{\partial f^{(1)}}{\partial t} \right)_{coll} - \frac{e}{\hbar} \left( \frac{\vec{v}(\vec{k})}{c} \times \vec{B} \right) \cdot \nabla_{\vec{k}} f^{(1)}$$

Sostituendo entrambi contenuti:

$$\vec{v}(\vec{k}) \cdot \nabla_{\vec{r}} f^0 = \frac{1}{\beta} \frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \vec{v}(\vec{k}) \cdot \nabla_{\vec{r}} [\beta(\varepsilon_{\vec{k}} - \mu(\vec{r}))]$$

$$\frac{e}{\hbar} \vec{E} \cdot \nabla_{\vec{k}} f^0 = e \vec{E} \cdot \vec{v}(\vec{k}) \left( \frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \right)$$

l'equazione linearizzata di Boltzmann diventa:

$$\frac{1}{\beta} \frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \vec{v}(\vec{k}) \cdot \nabla_{\vec{r}} [\beta(\varepsilon_{\vec{k}} - \mu(\vec{r}))] + e \vec{E} \cdot \vec{v}(\vec{k}) \left( \frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \right) = \left( \frac{\partial f^{(1)}}{\partial t} \right)_{coll} - \frac{e}{\hbar} \left( \frac{\vec{v}(\vec{k})}{c} \times \vec{B} \right) \cdot \nabla_{\vec{k}} f^{(1)}$$

Al primo membro, il termine che cambia più rapidamente è  $\frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon}$ .

Quindi per il secondo membro, possiamo assumere che  $f^{(1)}$  sia proporzionale a  $\frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon}$ , a fattore con una funzione  $\phi(\vec{k}, \vec{r})$  che riporti la dipendenza con  $\vec{k}$  e  $\vec{r}$ , quindi:

# 5.2 FUNZIONE DI DISTRIBUZIONE ELETTRONICA

## 5.2.3 Approssimazione con il tempo di rilassamento

$$\frac{1}{\beta} \frac{\partial f^0}{\partial \mathcal{E}} \vec{v}(\vec{k}) \cdot \nabla_{\vec{r}} [\beta(\mathcal{E}_{\vec{k}} - \mu(\vec{r}))] + e \vec{E} \cdot \vec{v}(\vec{k}) \left( \frac{\partial f^0}{\partial \mathcal{E}} \right) = \left( \frac{\partial f^{(1)}}{\partial t} \right)_{coll} - \frac{e}{\hbar} \left( \frac{\vec{v}(\vec{k})}{c} \times \vec{B} \right) \cdot \nabla_{\vec{k}} f^{(1)}$$

$$f^{(1)} \equiv - \left( \frac{\partial f^0}{\partial \mathcal{E}} \right) \phi(\vec{k}, \vec{r})$$

Con questa assunzione, possiamo riscrivere i due addendi del secondo membro dell'equazione linearizzata di Boltzmann:

$$\left( \frac{\partial f^{(1)}}{\partial t} \right)_{coll} = - \frac{f^{(1)}}{\tau_{\vec{k}}} = \left( \frac{\partial f^0}{\partial \mathcal{E}} \right) \frac{\phi(\vec{k}, \vec{r})}{\tau_{\vec{k}}}$$

e il secondo addendo:

$$\frac{e}{\hbar} \left( \frac{\vec{v}(\vec{k})}{c} \times \vec{B} \right) \cdot \nabla_{\vec{k}} f^{(1)} = \left( \frac{\partial f^0}{\partial \mathcal{E}} \right) \frac{e}{\hbar} \left[ \frac{\vec{v}(\vec{k})}{c} \times \vec{B} \right] \cdot \nabla_{\vec{k}} \phi(\vec{k}, \vec{r})$$

# 5.2 FUNZIONE DI DISTRIBUZIONE ELETTRONICA

## 5.2.3 Approssimazione con il tempo di rilassamento

$$\frac{1}{\beta} \frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \vec{v}(\vec{k}) \cdot \nabla_{\vec{r}} [\beta(\varepsilon_{\vec{k}} - \mu(\vec{r}))] + e\vec{E} \cdot \vec{v}(\vec{k}) \left( \frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \right) = \left( \frac{\partial f^{(1)}}{\partial t} \right)_{coll} - \frac{e}{\hbar} \left( \frac{\vec{v}(\vec{k})}{c} \times \vec{B} \right) \cdot \nabla_{\vec{k}} f^{(1)}$$

In definitiva, l'equazione linearizzata di Boltzmann diventa:

$$\frac{1}{\beta} \frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \vec{v}(\vec{k}) \cdot \nabla_{\vec{r}} [\beta(\varepsilon_{\vec{k}} - \mu(\vec{r}))] + e\vec{E} \cdot \vec{v}(\vec{k}) \left( \frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \right) = \left( \frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \right) \frac{\phi(\vec{k}, \vec{r})}{\tau_{\vec{k}}} + \left( \frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \right) \frac{e}{\hbar} \left( \frac{\vec{v}(\vec{k})}{c} \times \vec{B} \right) \cdot \nabla_{\vec{k}} \phi(\vec{k}, \vec{r})$$

Notiamo che tutti i termini hanno in comune  $\frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon}$ .

Poiché  $f^0$  è la funzione di Fermi-Dirac che a basse temperature è approssimabile ad una funzione gradino in  $\varepsilon = \mu$ , allora ne consegue che la derivata è la delta di Dirac:

$$\left( \frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \right) \sim \delta(\varepsilon - \mu)$$

# 5.2 FUNZIONE DI DISTRIBUZIONE ELETTRONICA

## 5.2.3 Approssimazione con il tempo di rilassamento

$$\frac{1}{\beta} \frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \vec{v}(\vec{k}) \cdot \nabla_{\vec{r}} [\beta(\varepsilon_{\vec{k}} - \mu(\vec{r}))] + e\vec{E} \cdot \vec{v}(\vec{k}) \left( \frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \right) = \left( \frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \right) \frac{\phi(\vec{k}, \vec{r})}{\tau_{\vec{k}}} + \left( \frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \right) \frac{e}{\hbar} \left( \frac{\vec{v}(\vec{k})}{c} \times \vec{B} \right) \cdot \nabla_{\vec{k}} \phi(\vec{k}, \vec{r})$$

$$\left( \frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \right) \sim \delta(\varepsilon - \mu)$$

Ricordando che  $\beta(\vec{r}) = \frac{1}{KT(\vec{r})}$ , la versione finale dell'equazione linearizzata di Boltzmann diventa:

$$T(\vec{r}) \vec{v}(\vec{k}) \cdot \nabla_{\vec{r}} \left[ \frac{\varepsilon_{\vec{k}} - \mu(\vec{r})}{T(\vec{r})} \right] + e\vec{E} \cdot \vec{v}(\vec{k}) = \frac{\phi(\vec{k}, \vec{r})}{\tau_{\vec{k}}} + \frac{e}{\hbar c} [\vec{v}(\vec{k}) \times \vec{B}] \cdot \nabla_{\vec{k}} \phi(\vec{k}, \vec{r})$$

Risolvendola, si determina  $\phi(\vec{k}, \vec{r})$  da cui poi  $f^{(1)}$  per le proprietà di trasporto del cristallo.

$$f^{(1)} \equiv - \left( \frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \right) \phi(\vec{k}, \vec{r})$$

# 5.3 CONDUCEBILITA' ELETTRICA E TERMICA

## 5.3.1 Conducibilit  elettrica isoterma

$$T(\vec{r})\vec{v}(\vec{k}) \cdot \nabla_{\vec{r}} \left[ \frac{\varepsilon_{\vec{k}} - \mu(\vec{r})}{T(\vec{r})} \right] + e\vec{E} \cdot \vec{v}(\vec{k}) = \frac{\phi(\vec{k}, \vec{r})}{\tau_{\vec{k}}} + \frac{e}{\hbar c} [\vec{v}(\vec{k}) \times \vec{B}] \cdot \nabla_{\vec{k}} \phi(\vec{k}, \vec{r})$$

Consideriamo un cristallo a cui   applicato un campo elettrico uniforme  $\vec{E}$  all'equilibrio termico, ovvero la temperatura  $T$  e il potenziale  $\mu$  sono indipendenti da  $\vec{r}$ .

Se  $\vec{E}$    piccolo, possiamo usare l'equazione linearizzata di Boltzmann per determinare  $f$  e  $\vec{j}$ , e quindi il tensore di conducibilit  elettrica  $\sigma$ .

Poich   $T$  e  $\mu$  sono costanti ( $\nabla_{\vec{r}} \left[ \frac{\varepsilon_{\vec{k}} - \mu(\vec{r})}{T(\vec{r})} \right] = 0$ ) e  $\vec{B} = 0$  ( $\frac{e}{\hbar c} [\vec{v}(\vec{k}) \times \vec{B}] \cdot \nabla_{\vec{k}} \phi(\vec{k}, \vec{r}) = 0$ ), l'equazione linearizzata di Boltzmann diventa:

$$\phi(\vec{k}, \vec{r}) = e\vec{E} \cdot \vec{v}(\vec{k})\tau_{\vec{k}}$$

e quindi:

$$f^{(1)} = - \left( \frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \right) \phi(\vec{k}, \vec{r}) = - \frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} e\vec{E} \cdot \vec{v}(\vec{k})\tau_{\vec{k}}$$

# 5.3 CONDUCEBILITA' ELETTRICA E TERMICA

## 5.3.1 Conducibilità elettrica isoterma

$$f^{(1)} = - \left( \frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \right) \phi(\vec{k}, \vec{r}) = - \frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} e \vec{E} \cdot \vec{v}(\vec{k}) \tau_{\vec{k}}$$

Utilizziamo la definizione data prima di densità di corrente:

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = \frac{2e}{(2\pi)^3} \int d\vec{k} \vec{v}(\vec{k}) f(\vec{k}, \vec{r}, t)$$

Poiché  $f^0$  non produce corrente, allora  $f \approx f^{(1)}$  e quindi:

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = \frac{2e}{(2\pi)^3} \int d\vec{k} \vec{v}(\vec{k}) f^{(1)} = \frac{e}{4\pi^3} \int d\vec{k} \vec{v}(\vec{k}) \left( - \frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \right) e \vec{E} \cdot \vec{v}(\vec{k}) \tau_{\vec{k}}$$

Poiché  $\vec{E}$  può essere portato fuori dall'integrale, possiamo scrivere:

$$\vec{j} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \vec{E}$$

$$\text{con } \boldsymbol{\sigma} = \frac{e^2}{4\pi^3} \int d\vec{k} \vec{v}(\vec{k}) \vec{v}(\vec{k}) \left( - \frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \right) \tau_{\vec{k}}$$

# 5.3 CONDUCEBILITA' ELETTRICA E TERMICA

## 5.3.1 Conducibilità elettrica isoterma

$$\vec{j} = \sigma \cdot \vec{E} \quad \sigma = \frac{e^2}{4\pi^3} \int d\vec{k} \vec{v}(\vec{k}) \vec{v}(\vec{k}) \left( -\frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \right) \tau_{\vec{k}}$$

Questa è l'equazione di Boltzmann linearizzata per la conducibilità dei metalli nell'approssimazione del tempo di rilassamento.

I parametri specifici del materiale sono contenuti in  $\vec{v}(\vec{k})$  e  $\tau_{\vec{k}}$ .

Poiché  $-\frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon}$  è una funzione sharp in corrispondenza dell'energia di Fermi, la geometria della superficie di Fermi e le proprietà degli stati elettronici vicino alla superficie di Fermi determinano  $\sigma$ .

La conducibilità elettrica dipende dalla temperatura perché sia  $\tau_{\vec{k}}$  che  $\frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon}$  dipendono dalla temperatura.

$$f^{(1)} = -\left( \frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \right) \phi(\vec{k}, \vec{r}) = -\frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} e\vec{E} \cdot \vec{v}(\vec{k}) \tau_{\vec{k}}$$

La funzione di distribuzione per la conducibilità elettrica sarà:

$$f(\vec{k}) = f^0(\vec{k}) + f^{(1)}(\vec{k}) = f^0(\vec{k}) - \frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} e\vec{E} \cdot \vec{v}(\vec{k}) \tau_{\vec{k}}$$

# 5.3 CONDUCEBILITA' ELETTRICA E TERMICA

## 5.3.1 Conducibilità elettrica isoterma

$$f(\vec{k}) = f^0(\vec{k}) + f^{(1)}(\vec{k}) = f^0(\vec{k}) - \frac{\partial f^0}{\partial \mathcal{E}} e\vec{E} \cdot \vec{v}(\vec{k}) \tau_{\vec{k}}$$

Usando la relazione  $\vec{v}(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} \mathcal{E}(\vec{k})$ , si ha:

$$\frac{\partial f^0}{\partial \mathcal{E}} \nabla_{\vec{k}} \mathcal{E}(\vec{k}) = \nabla_{\vec{k}} f^0$$

$$f(\vec{k}) = f^0(\vec{k}) - \nabla_{\vec{k}} f^0 \cdot \frac{e\vec{E}}{\hbar} \tau_{\vec{k}}$$

Possiamo vedere quest'espressione come uno sviluppo in serie di Taylor attorno al valore  $\left(\frac{e\vec{E}}{\hbar} \tau_{\vec{k}}\right)$ , e quindi:

$$f(\vec{k}) \approx f^0\left(\vec{k} - \frac{e\vec{E}}{\hbar} \tau_{\vec{k}}\right)$$

Se  $\tau_{\vec{k}}$  è indipendente da  $\vec{k}$ , allora l'equazione rappresenta la distribuzione  $f$  come se l'intera distribuzione di Fermi fosse stata shiftata della quantità  $\left(\frac{e\vec{E}}{\hbar} \tau_{\vec{k}}\right)$  nello spazio  $\vec{k}$ .



# 5.3 CONDUCEBILITA' ELETTRICA E TERMICA

## 5.3.2 Conducibilità termoelettrica

Consideriamo il caso di un cristallo immerso in un campo elettrico uniforme  $\vec{E}$  con due estremità a temperature differenti.

Ci sarà una dipendenza dalla posizione della temperatura locale  $T(\vec{r})$  e del potenziale chimico locale  $\mu(\vec{r})$ .

In queste condizioni l'equazione linearizzata di Boltzmann, assumendo  $\vec{B} = 0$ , diventa:

$$T(\vec{r})\vec{v}(\vec{k}) \cdot \nabla_{\vec{r}} \left[ \frac{\varepsilon_{\vec{k}} - \mu(\vec{r})}{T(\vec{r})} \right] + e\vec{E} \cdot \vec{v}(\vec{k}) = \frac{\phi(\vec{k}, \vec{r})}{\tau_{\vec{k}}} + \frac{e}{\hbar c} [\vec{v}(\vec{k}) \times \vec{B}] \cdot \nabla_{\vec{k}} \phi(\vec{k}, \vec{r})$$

$$T(\vec{r})\vec{v}(\vec{k}) \cdot \nabla_{\vec{r}} \left[ \frac{\varepsilon(\vec{k}) - \mu(\vec{r})}{T(\vec{r})} \right] + e\vec{E} \cdot \vec{v}(\vec{k}) = \frac{\phi(\vec{k}, \vec{r})}{\tau_{\vec{k}}}$$

Analizziamo il termine  $\nabla_{\vec{r}} \left[ \frac{\varepsilon(\vec{k}) - \mu(\vec{r})}{T(\vec{r})} \right]$  e separiamo i due contributi del gradiente:

$$\nabla_{\vec{r}} \left[ \frac{\varepsilon(\vec{k}) - \mu(\vec{r})}{T(\vec{r})} \right] = \nabla_{\vec{r}} \left[ \frac{\varepsilon(\vec{k})}{T(\vec{r})} \right] - \nabla_{\vec{r}} \left[ \frac{\mu(\vec{r})}{T(\vec{r})} \right]$$

# 5.3 CONDUCEBILITA' ELETTRICA E TERMICA

## 5.3.2 Conducibilità termoelettrica

$$\nabla_{\vec{r}} \left[ \frac{\mathcal{E}(\vec{k}) - \mu(\vec{r})}{T(\vec{r})} \right] = \nabla_{\vec{r}} \left[ \frac{\mathcal{E}(\vec{k})}{T(\vec{r})} \right] - \nabla_{\vec{r}} \left[ \frac{\mu(\vec{r})}{T(\vec{r})} \right]$$

Il primo addendo del secondo membro lo esprimiamo come:

$$\nabla_{\vec{r}} \left[ \frac{\mathcal{E}(\vec{k})}{T(\vec{r})} \right] = \nabla_{\vec{r}} T \frac{\partial \left[ \frac{\mathcal{E}(\vec{k})}{T} \right]}{\partial T}$$

Supponiamo che  $\mathcal{E}(\vec{k})$  vari debolmente con la temperatura, allora:

$$\frac{\partial \left[ \frac{\mathcal{E}(\vec{k})}{T} \right]}{\partial T} = - \frac{\mathcal{E}(\vec{k})}{T^2}$$

Sostituendo:

$$\nabla_{\vec{r}} \left[ \frac{\mathcal{E}(\vec{k}) - \mu(\vec{r})}{T(\vec{r})} \right] = - \nabla_{\vec{r}} T \frac{\mathcal{E}(\vec{k})}{T^2} - \nabla_{\vec{r}} \left[ \frac{\mu(\vec{r})}{T(\vec{r})} \right]$$

# 5.3 CONDUCEBILITA' ELETTRICA E TERMICA

## 5.3.2 Conducibilit  termoelettrica

$$T(\vec{r})\vec{v}(\vec{k}) \cdot \nabla_{\vec{r}} \left[ \frac{\varepsilon(\vec{k}) - \mu(\vec{r})}{T(\vec{r})} \right] + e\vec{E} \cdot \vec{v}(\vec{k}) = \frac{\phi(\vec{k}, \vec{r})}{\tau_{\vec{k}}}$$

$$\nabla_{\vec{r}} \left[ \frac{\varepsilon(\vec{k}) - \mu(\vec{r})}{T(\vec{r})} \right] = -\nabla_{\vec{r}} T \frac{\varepsilon(\vec{k})}{T^2} - \nabla_{\vec{r}} \left[ \frac{\mu(\vec{r})}{T(\vec{r})} \right]$$

Sostituiamo nell'equazione linearizzata di Boltzmann per avere:

$$T(\vec{r})\vec{v}(\vec{k}) \cdot \left\{ -\nabla_{\vec{r}} T \frac{\varepsilon(\vec{k})}{T^2} - \nabla_{\vec{r}} \left[ \frac{\mu(\vec{r})}{T(\vec{r})} \right] \right\} + e\vec{E} \cdot \vec{v}(\vec{k}) = \frac{\phi(\vec{k}, \vec{r})}{\tau_{\vec{k}}}$$

da cui ricaviamo che:

$$\phi(\vec{k}, \vec{r}) = \tau_{\vec{k}}\vec{v}(\vec{k}) \cdot \left\{ T(\vec{r}) \left[ -\nabla_{\vec{r}} T \frac{\varepsilon(\vec{k})}{T^2} - \nabla_{\vec{r}} \left[ \frac{\mu(\vec{r})}{T(\vec{r})} \right] \right] + e\vec{E} \right\}$$

Ricordando che la densit  di corrente  :

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = \frac{2e}{(2\pi)^3} \int d\vec{k} \vec{v}(\vec{k}) f(\vec{k}, \vec{r}, t)$$

# 5.3 CONDUCEBILITA' ELETTRICA E TERMICA

## 5.3.2 Conducibilit  termoelettrica

$$\phi(\vec{k}, \vec{r}) = \tau_{\vec{k}} \vec{v}(\vec{k}) \cdot \left\{ T(\vec{r}) \left[ -\nabla_{\vec{r}} T \frac{\mathcal{E}(\vec{k})}{T^2} - \nabla_{\vec{r}} \left[ \frac{\mu(\vec{r})}{T(\vec{r})} \right] \right] + e\vec{E} \right\}$$

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = \frac{2e}{(2\pi)^3} \int d\vec{k} \vec{v}(\vec{k}) f(\vec{k}, \vec{r}, t)$$

Nell'ipotesi che  $f^{(1)} = -\left(\frac{\partial f^0}{\partial \mathcal{E}}\right) \phi(\vec{k}, \vec{r})$  e che  $f^0$  non d  luogo ad una densit  di corrente, si ha:

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = \frac{2e}{(2\pi)^3} \int d\vec{k} \vec{v}(\vec{k}) \left( -\frac{\partial f^0}{\partial \mathcal{E}} \right) \phi(\vec{k}, \vec{r})$$

Sostituiamo l'espressione per  $\phi(\vec{k}, \vec{r})$ :

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = \frac{2e}{(2\pi)^3} \int d\vec{k} \vec{v}(\vec{k}) \left( -\frac{\partial f^0}{\partial \mathcal{E}} \right) \tau_{\vec{k}} \vec{v}(\vec{k}) \cdot \left\{ T(\vec{r}) \left[ -\nabla_{\vec{r}} T \frac{\mathcal{E}(\vec{k})}{T^2} - \nabla_{\vec{r}} \left[ \frac{\mu(\vec{r})}{T(\vec{r})} \right] \right] + e\vec{E} \right\}$$

# 5.3 CONDUCEBILITA' ELETTRICA E TERMICA

## 5.3.2 Conducibilità termoelettrica

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = \frac{2e}{(2\pi)^3} \int d\vec{k} \vec{v}(\vec{k}) \left( -\frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \right) \tau_{\vec{k}} \vec{v}(\vec{k}) \cdot \left\{ T(\vec{r}) \left[ -\nabla_{\vec{r}} T \frac{\varepsilon(\vec{k})}{T^2} - \nabla_{\vec{r}} \left[ \frac{\mu(\vec{r})}{T(\vec{r})} \right] \right] + e\vec{E} \right\}$$

Possiamo quindi separare i **contributi termici** da quelli dovuti al **campo elettrico**  $\vec{E}$ :

$$\begin{aligned} \vec{j}(\vec{r}, t) &= \frac{2e}{(2\pi)^3} \int d\vec{k} \vec{v}(\vec{k}) \left( -\frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \right) \tau_{\vec{k}} \vec{v}(\vec{k}) \cdot \left\{ T(\vec{r}) \left[ -\nabla_{\vec{r}} T \frac{\varepsilon(\vec{k})}{T^2} - \nabla_{\vec{r}} \left[ \frac{\mu(\vec{r})}{T(\vec{r})} \right] \right] \right\} \\ &+ \frac{2e}{(2\pi)^3} \int d\vec{k} \vec{v}(\vec{k}) e \left( -\frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \right) \tau_{\vec{k}} \vec{v}(\vec{k}) \cdot \vec{E} \end{aligned}$$

Quindi, ricordando la definizione di  $\sigma = \frac{e^2}{4\pi^3} \int d\vec{k} \vec{v}(\vec{k}) \vec{v}(\vec{k}) \left( -\frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \right) \tau_{\vec{k}}$ , si ha:

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = \frac{2e}{(2\pi)^3} \int d\vec{k} \vec{v}(\vec{k}) \left( -\frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \right) \tau_{\vec{k}} \vec{v}(\vec{k}) \cdot \left\{ T(\vec{r}) \left[ -\nabla_{\vec{r}} T \frac{\varepsilon(\vec{k})}{T^2} - \nabla_{\vec{r}} \left[ \frac{\mu(\vec{r})}{T(\vec{r})} \right] \right] \right\} + \sigma \cdot \vec{E}$$

# 5.3 CONDUCEBILITA' ELETTRICA E TERMICA

## 5.3.2 Conducibilit  termoelettrica

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = \frac{2e}{(2\pi)^3} \int d\vec{k} \vec{v}(\vec{k}) \left( -\frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \right) \tau_{\vec{k}} \vec{v}(\vec{k}) \cdot \left\{ T(\vec{r}) \left[ -\nabla_{\vec{r}} T \frac{\varepsilon(\vec{k})}{T^2} - \nabla_{\vec{r}} \left[ \frac{\mu(\vec{r})}{T(\vec{r})} \right] \right] \right\} + \sigma \cdot \vec{E}$$

Abbiamo quindi separato i fenomeni elettrici da quelli termici.

Se supponiamo che  $\vec{E} = 0$  e che il potenziale chimico cambi debolmente con la posizione, ovvero:

$$\nabla_{\vec{r}} \left[ \frac{\mu(\vec{r})}{T(\vec{r})} \right] \approx 0$$

Allora la densit  di corrente termica sar :

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = -\frac{2e}{(2\pi)^3} \int d\vec{k} \vec{v}(\vec{k}) \left( -\frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \right) \tau_{\vec{k}} \frac{\varepsilon(\vec{k})}{T} \vec{v}(\vec{k}) \cdot \nabla_{\vec{r}} T$$

# 5.3 CONDUCEBILITA' ELETTRICA E TERMICA

## 5.3.2 Conducibilit  termoelettrica

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = -\frac{2e}{(2\pi)^3} \int d\vec{k} \vec{v}(\vec{k}) \left( -\frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \right) \tau_{\vec{k}} \frac{\varepsilon(\vec{k})}{T} \vec{v}(\vec{k}) \cdot \nabla_{\vec{r}} T$$

Definiamo  $\mathbf{S}$  come:

$$\mathbf{S} = \frac{2e}{(2\pi)^3} \int d\vec{k} \vec{v}(\vec{k}) \left( -\frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \right) \tau_{\vec{k}} \frac{\varepsilon(\vec{k})}{T} \vec{v}(\vec{k})$$

E quindi la densit  di corrente sar :

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = -\mathbf{S} \cdot \nabla_{\vec{r}} T$$

che descrive la presenza di una densit  di corrente in corrispondenza di un gradiente spaziale di temperatura. Questo fenomeno   noto come effetto Seebeck.

# 5.3 CONDUCEBILITA' ELETTRICA E TERMICA

## 5.3.3 Conducibilità termica

Così come la densità di corrente elettronica  $\vec{j}(\vec{r}, t)$  è stata definita come il numero di portatori che attraversano un'area unitaria per unità di tempo, ovvero:

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = e\vec{v}(\vec{k})dN = \frac{2e}{(2\pi)^3} \int d\vec{k}\vec{v}(\vec{k})f(\vec{k}, \vec{r}, t)$$

$dN = \frac{2}{(2\pi)^3} f(\vec{k}, \vec{r})d\vec{k}d\vec{r}$

allo stesso modo possiamo definire il flusso di energia  $\vec{Q}(\vec{r}, t)$  come l'energia che attraversa un'area unitaria per unità di tempo:

$$\vec{Q}(\vec{r}, t) = \mathcal{E}(\vec{k})\vec{v}(\vec{k})dN$$

Sostituendo l'espressione per  $dN$  si ottiene:

$$\vec{Q}(\vec{r}, t) = \frac{2}{(2\pi)^3} \int d\vec{k}\mathcal{E}(\vec{k})\vec{v}(\vec{k})f(\vec{k}, \vec{r}, t)$$

Poiché  $f^0$  non produce corrente, allora  $f \approx f^{(1)}$  e quindi, essendo:

$$f^{(1)} = -\left(\frac{\partial f^0}{\partial \mathcal{E}}\right)\phi(\vec{k}, \vec{r})$$



# 5.3 CONDUCEBILITA' ELETTRICA E TERMICA

## 5.3.3 Conducibilità termica

$$\vec{Q}(\vec{r}, t) = \frac{2}{(2\pi)^3} \int d\vec{k} \varepsilon(\vec{k}) \vec{v}(\vec{k}) f(\vec{k}, \vec{r}, t)$$

$$f^{(1)} = - \left( \frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \right) \phi(\vec{k}, \vec{r})$$

Si ottiene per il flusso di energia:

$$\vec{Q}(\vec{r}, t) = \frac{1}{4\pi^3} \int d\vec{k} \varepsilon(\vec{k}) \vec{v}(\vec{k}) \left( - \frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \right) \phi(\vec{k}, \vec{r})$$

Ricordiamo l'espressione generale che abbiamo ricavato per  $\phi(\vec{k}, \vec{r})$  :

$$\phi(\vec{k}, \vec{r}) = \tau_{\vec{k}} \vec{v}(\vec{k}) \cdot \left\{ T(\vec{r}) \left[ -\nabla_{\vec{r}} T \frac{\varepsilon(\vec{k})}{T^2} - \nabla_{\vec{r}} \left[ \frac{\mu(\vec{r})}{T(\vec{r})} \right] \right] + e\vec{E} \right\}$$

Utilizzando l'ipotesi  $\nabla_{\vec{r}} \left[ \frac{\mu(\vec{r})}{T(\vec{r})} \right] \approx 0$ , l'espressione per  $\phi(\vec{k}, \vec{r})$  diventa:

$$\phi(\vec{k}, \vec{r}) = \tau_{\vec{k}} \vec{v}(\vec{k}) \cdot \left\{ T(\vec{r}) \left[ -\nabla_{\vec{r}} T \frac{\varepsilon(\vec{k})}{T^2} \right] + e\vec{E} \right\}$$

# 5.3 CONDUCEBILITA' ELETTRICA E TERMICA

## 5.3.3 Conducibilità termica

$$\phi(\vec{k}, \vec{r}) = \tau_{\vec{k}} \vec{v}(\vec{k}) \cdot \left\{ T(\vec{r}) \left[ -\nabla_{\vec{r}} T \frac{\epsilon(\vec{k})}{T^2} \right] + e\vec{E} \right\}$$

Sviluppiamo la parentesi graffa:

$$\phi(\vec{k}, \vec{r}) = -\tau_{\vec{k}} \vec{v}(\vec{k}) \cdot \nabla_{\vec{r}} T \frac{\epsilon(\vec{k})}{T} + e\tau_{\vec{k}} \vec{v}(\vec{k}) \cdot \vec{E}$$

e sostituiamo nella  $\vec{Q}(\vec{r}, t)$ :

$$\vec{Q}(\vec{r}, t) = \frac{1}{4\pi^3} \int d\vec{k} \epsilon(\vec{k}) \vec{v}(\vec{k}) \left( -\frac{\partial f^0}{\partial \epsilon} \right) \phi(\vec{k}, \vec{r})$$

$$\begin{aligned} \vec{Q}(\vec{r}, t) &= -\frac{1}{4\pi^3} \int d\vec{k} \epsilon(\vec{k}) \vec{v}(\vec{k}) \left( -\frac{\partial f^0}{\partial \epsilon} \right) \tau_{\vec{k}} \vec{v}(\vec{k}) \cdot \nabla_{\vec{r}} T \frac{\epsilon(\vec{k})}{T} \\ &+ \frac{1}{4\pi^3} \int d\vec{k} \epsilon(\vec{k}) \vec{v}(\vec{k}) \left( -\frac{\partial f^0}{\partial \epsilon} \right) e\tau_{\vec{k}} \vec{v}(\vec{k}) \cdot \vec{E} \end{aligned}$$

# 5.3 CONDUCEBILITA' ELETTRICA E TERMICA

## 5.3.3 Conducibilità termica

$$\vec{Q}(\vec{r}, t) = -\frac{1}{4\pi^3} \int d\vec{k} \varepsilon(\vec{k}) \vec{v}(\vec{k}) \left( -\frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \right) \tau_{\vec{k}} \vec{v}(\vec{k}) \cdot \nabla_{\vec{r}} T \frac{\varepsilon(\vec{k})}{T} + \frac{1}{4\pi^3} \int d\vec{k} \varepsilon(\vec{k}) \vec{v}(\vec{k}) \left( -\frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \right) e \tau_{\vec{k}} \vec{v}(\vec{k}) \cdot \vec{E}$$

Conviene introdurre:

$$L^{(n)} = \frac{1}{4\pi^3} \int d\vec{k} \varepsilon^n(\vec{k}) \vec{v}(\vec{k}) \left( -\frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \right) \tau_{\vec{k}} \vec{v}(\vec{k})$$

e riscrivere la  $\vec{Q}(\vec{r}, t)$  in forma più compatta:

$$\vec{Q}(\vec{r}, t) = L^{(1)} \cdot e\vec{E} + L^{(2)} \cdot \left( -\frac{\nabla_{\vec{r}} T}{T} \right)$$

Con questo formalismo possiamo riscrivere anche  $\vec{j}(\vec{r}, t)$ :

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = \frac{2e}{(2\pi)^3} \int d\vec{k} \vec{v}(\vec{k}) \left( -\frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \right) \tau_{\vec{k}} \vec{v}(\vec{k}) \cdot \left\{ -\nabla_{\vec{r}} T \frac{\varepsilon(\vec{k})}{T} \right\} + \frac{2e}{(2\pi)^3} \int d\vec{k} \vec{v}(\vec{k}) e \left( -\frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \right) \tau_{\vec{k}} \vec{v}(\vec{k}) \cdot \vec{E}$$

come:

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = L^{(0)} \cdot e^2 \vec{E} + e L^{(1)} \cdot \left( -\frac{\nabla_{\vec{r}} T}{T} \right)$$

# 5.3 CONDUCEBILITA' ELETTRICA E TERMICA

## 5.3.3 Conducibilità termica

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = L^{(0)} \cdot e^2 \vec{E} + eL^{(1)} \left( -\frac{\nabla_{\vec{r}} T}{T} \right)$$
$$\vec{Q}(\vec{r}, t) = L^{(1)} \cdot e\vec{E} + L^{(2)} \cdot \left( -\frac{\nabla_{\vec{r}} T}{T} \right)$$

La definizione di conducibilità termica di un cristallo passa dalla definizione di quando calore fluisce attraverso il cristallo se questo è sottoposto ad una differenza di temperatura, con la condizione che non ci sia una corrente elettrica.

Dall'ultima definizione di  $\vec{j}(\vec{r}, t)$  si deduce chiaramente che se  $\nabla_{\vec{r}} T \neq 0$ , per avere  $\vec{j}(\vec{r}, t) = 0$  vuol dire che un campo elettrico deve essere prodotto anche se non c'è un campo esterno applicato.

Quindi:

$$0 = L^{(0)} \cdot e^2 \vec{E} + eL^{(1)} \left( -\frac{\nabla_{\vec{r}} T}{T} \right)$$

Da cui:

$$L^{(0)} \cdot e\vec{E} = -L^{(1)} \left( -\frac{\nabla_{\vec{r}} T}{T} \right)$$

# 5.3 CONDUCEBILITA' ELETTRICA E TERMICA

## 5.3.3 Conducibilità termica

$$L^{(0)} \cdot e\vec{E} = -L^{(1)} \left( -\frac{\nabla_{\vec{r}} T}{T} \right)$$

Applico prima l'operatore inverso  $(L^{(0)})^{-1}$

$$e\vec{E} = -(L^{(0)})^{-1} L^{(1)} \left( -\frac{\nabla_{\vec{r}} T}{T} \right)$$

E poi l'operatore  $L^{(1)}$ :

$$L^{(1)} \cdot e\vec{E} = -L^{(1)} (L^{(0)})^{-1} L^{(1)} \left( -\frac{\nabla_{\vec{r}} T}{T} \right)$$

Sostituiamo nell'espressione per  $\vec{Q}(\vec{r}, t)$ :

$$\vec{Q}(\vec{r}, t) = L^{(1)} \cdot e\vec{E} + L^{(2)} \cdot \left( -\frac{\nabla_{\vec{r}} T}{T} \right)$$

$$\vec{Q}(\vec{r}, t) = -L^{(1)} (L^{(0)})^{-1} L^{(1)} \left( -\frac{\nabla_{\vec{r}} T}{T} \right) + L^{(2)} \left( -\frac{\nabla_{\vec{r}} T}{T} \right)$$

# 5.3 CONDUCEBILITA' ELETTRICA E TERMICA

## 5.3.3 Conducibilità termica

$$\vec{Q}(\vec{r}, t) = -L^{(1)}(L^{(0)})^{-1}L^{(1)}\left(-\frac{\nabla_{\vec{r}}T}{T}\right) + L^{(2)}\left(-\frac{\nabla_{\vec{r}}T}{T}\right)$$

Raccogliendo il fattore  $\left(-\frac{\nabla_{\vec{r}}T}{T}\right)$

$$\vec{Q}(\vec{r}, t) = -\left[-L^{(1)}(L^{(0)})^{-1}L^{(1)} + L^{(2)}\right]\left(\frac{\nabla_{\vec{r}}T}{T}\right)$$

Definiamo il tensore di conducibilità termica come:

$$\mathbf{K}_{th} = \frac{L^{(2)} - L^{(1)}(L^{(0)})^{-1}L^{(1)}}{T}$$

Che ci porta a scrivere:

$$\vec{Q}(\vec{r}, t) = -\mathbf{K}_{th}\nabla_{\vec{r}}T$$

che rappresenta l'equazione di Fourier della conducibilità termica nei cristalli.

# 5.4 EQUAZIONI DI DERIVA-DIFFUSIONE

## 5.4.1 Equazione di diffusione

Riprendiamo l'equazione di Boltzmann linearizzata:

$$\vec{v}(\vec{k}) \cdot \nabla_{\vec{r}} f^0 + \frac{e}{\hbar} \vec{E} \cdot \nabla_{\vec{k}} f^0 = \left( \frac{\partial f^{(1)}}{\partial t} \right)_{coll} - \frac{e}{\hbar} \left( \frac{\vec{v}(\vec{k})}{c} \times \vec{B} \right) \cdot \nabla_{\vec{k}} f^{(1)}$$

In assenza di campi magnetici, il secondo addendo del secondo membro è nullo. Quindi:

$$\vec{v}(\vec{k}) \cdot \nabla_{\vec{r}} f^0 + \frac{e}{\hbar} \vec{E} \cdot \nabla_{\vec{k}} f^0 = \left( \frac{\partial f^{(1)}}{\partial t} \right)_{coll}$$

Abbiamo definito la densità di corrente elettronica  $\vec{j}(\vec{r}, t)$  come il numero di portatori che attraversano un'area unitaria per unità di tempo

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = \frac{2e}{(2\pi)^3} \int d\vec{k} \vec{v}(\vec{k}) f(\vec{k}, \vec{r})$$

Riscriviamola per il caso 1D, considerando l'asse x:

$$j(x, t) = \frac{2e}{(2\pi)} \int dk v f(k, x)$$

# 5.4 EQUAZIONI DI DERIVA-DIFFUSIONE

## 5.4.1 Equazione di diffusione

$$j(x, t) = \frac{2e}{(2\pi)} \int dk v f(k, x)$$

Riportiamo l'integrale nella variabile velocità. Ricordando:

$$v = \frac{1}{\hbar} \frac{d\mathcal{E}}{dk}$$

Differenziamo ambo i membri rispetto a  $k$ , e moltiplichiamo e dividiamo per  $\hbar$  il secondo membro:

$$\frac{dv}{dk} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2\mathcal{E}(k)}{dk^2} \hbar$$

In approssimazione parabolica, possiamo definire la massa effettiva come:

$$m^* = \left[ \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2\mathcal{E}(k)}{dk^2} \right]^{-1}$$

E quindi:

$$\frac{dv}{dk} = \frac{\hbar}{m^*}$$



# 5.4 EQUAZIONI DI DERIVA-DIFFUSIONE

## 5.4.1 Equazione di diffusione

$$j(x, t) = \frac{2e}{(2\pi)} \int dk v f(k, x)$$

$$dk = \frac{m^* dv}{\hbar}$$

$$k = \frac{m^* v}{\hbar}$$

Possiamo allora sostituire le espressioni appena trovate all'interno di  $f(k, x)$  nell'espressione della densità di corrente:

$$j(v, t) = \frac{e}{\pi} \int d \left( \frac{m^* dv}{\hbar} \right) v f \left( \frac{m^* v}{\hbar}, x \right)$$

Ovvero, introducendo una variabile  $v$  normalizzata su  $\frac{m^*}{\hbar}$ :

$$j(v, t) = e \int dv v f(v, x)$$

dove l'integrale di destra rappresenta il primo momento della funzione di distribuzione.

# 5.4 EQUAZIONI DI DERIVA-DIFFUSIONE

## 5.4.1 Equazione di diffusione

Riconduciamo anche l'equazione di Boltzmann al caso 1D:

$$v \frac{\partial f^0}{\partial x} + \frac{e}{\hbar} E \frac{\partial f^0}{\partial k} = \left( \frac{\partial f^{(1)}}{\partial t} \right)_{coll}$$

$$\vec{v}(\vec{k}) \cdot \nabla_{\vec{r}} f^0 + \frac{e}{\hbar} \vec{E} \cdot \nabla_{\vec{k}} f^0 = \left( \frac{\partial f^{(1)}}{\partial t} \right)_{coll}$$

Sostituendo anche in questo caso  $\partial k = \frac{m^* \partial v}{\hbar}$  si ottiene:

$$v \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{eE}{m^*} \frac{\partial f}{\partial v} = \left( \frac{\partial f^{(1)}}{\partial t} \right)_{coll}$$

Nell'approssimazione tempo di rilassamento:

$$\left( \frac{\partial f^{(1)}}{\partial t} \right)_{coll} = \frac{f^0 - f}{\tau}$$

E quindi:

$$v \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{eE}{m^*} \frac{\partial f}{\partial v} = \frac{f^0 - f}{\tau}$$

# 5.4 EQUAZIONI DI DERIVA-DIFFUSIONE

## 5.4.1 Equazione di diffusione

$$j(v, t) = e \int dv v f(v, x)$$

$$v \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{eE}{m^*} \frac{\partial f}{\partial v} = \frac{f^0 - f}{\tau}$$

Questa definizione di corrente può essere correlata all'equazione linearizzata di Boltzmann dopo aver moltiplicato entrambi i membri di quest'ultima per  $v$  e aver integrato su  $dv$ .

Applichiamolo inizialmente solo al membro di sinistra dell'equazione di Boltzmann:

$$\int dv v \left( \frac{f^0 - f}{\tau} \right) = \frac{1}{\tau} \left[ \int dv v f^0 - \int dv v f \right]$$

Poiché  $\int dv v f^0 = 0$  in quanto la funzione di distribuzione di equilibrio è simmetrica rispetto a  $v$ , allora:

$$\int dv v \left( \frac{f^0 - f}{\tau} \right) = -\frac{1}{\tau} \int dv v f = -\frac{1}{e\tau} j(v, t)$$

# 5.4 EQUAZIONI DI DERIVA-DIFFUSIONE

## 5.4.1 Equazione di diffusione

$$j(v, t) = e \int dv v f(v, x)$$

$$v \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{eE}{m^*} \frac{\partial f}{\partial v} = \frac{f^0 - f}{\tau}$$

$$\int dv v \left( \frac{f^0 - f}{\tau} \right) = -\frac{1}{e\tau} j(v, t)$$

Applicandolo anche al membro di destra dell'equazione di Boltzmann:

$$\int v \frac{\partial f(v, x)}{\partial x} dv + \frac{eE}{m^*} \int v \frac{\partial f(v, x)}{\partial v} dv = -\frac{1}{e\tau} j(v, t)$$

da cui:

$$j(v, t) = -e \frac{e\tau}{m^*} E \int v \frac{\partial f(v, x)}{\partial v} dv - e\tau \frac{\partial \int v^2 f(v, x) dv}{\partial x}$$

Il primo integrale possiamo risolverlo per parti:

$$\int v \frac{\partial f}{\partial v} dv = [vf(v, x)]_{-\infty}^{\infty} - \int f(v, x) dv = -n(x)$$

# 5.4 EQUAZIONI DI DERIVA-DIFFUSIONE

## 5.4.1 Equazione di diffusione

$$j(v, t) = -e \frac{e\tau}{m^*} E \int v \frac{\partial f(v, x)}{\partial v} dv - e\tau \frac{\partial \int v^2 f(v, x) dv}{\partial x}$$

$$\int v \frac{\partial f}{\partial v} dv = -n(x)$$

Il secondo integrale  $\int v^2 f(v, x) dv$  possiamo esprimerlo usando la definizione di valore medio di una funzione di distribuzione:

$$\langle v^2 \rangle := \frac{\int v^2 f(v, x) dv}{\int f(v, x) dv} = \frac{\int v^2 f(v, x) dv}{n(x)}$$

e quindi:

$$\int v^2 f(v, x) dv = n(x) \langle v^2 \rangle$$

Sostituendo entrambi i contributi, riscriviamo la densità di corrente:

$$j(v, t) = \frac{e^2 \tau}{m^*} E n(x) - e\tau \frac{\partial n(x)}{\partial x} \langle v^2 \rangle$$

# 5.4 EQUAZIONI DI DERIVA-DIFFUSIONE

## 5.4.1 Equazione di diffusione

$$j(v, t) = \frac{e^2 \tau}{m^*} E n(x) - e \tau \frac{\partial n(x)}{\partial x} \langle v^2 \rangle$$

Introduciamo la mobilità:

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

Inoltre, se assumiamo che ci sia l'equilibrio termico secondo il teorema di ripartizione dell'energia (in 1D):

$$\frac{1}{2} m^* \langle v^2 \rangle = \frac{1}{2} K T \quad \Rightarrow \quad \langle v^2 \rangle = \frac{K T}{m^*}$$

Sostituiamo:

$$j(v, t) = e \mu n(x) E - e \tau \frac{K T}{m^*} \frac{\partial n(x)}{\partial x}$$

Introduciamo la mobilità anche al secondo addendo del secondo membro:

$$j(v, t) = e \mu n(x) E - e \mu K T \frac{\partial n(x)}{\partial x}$$

# 5.4 EQUAZIONI DI DERIVA-DIFFUSIONE

## 5.4.1 Equazione di diffusione

$$j(v, t) = e\mu n(x)E - e\mu KT \frac{\partial n(x)}{\partial x}$$

Definiamo il coefficiente di diffusione:  $D = \frac{\mu KT}{e}$

e la densità di corrente diventa:

$$j(v, t) = e\mu n(x)E - eD \frac{\partial n(x)}{\partial x}$$

Nel caso dei semiconduttori, possiamo ripetere tutta la trattazione anche per le lacune e introducendo  $q$  come il valore assoluto della carica elettrica, abbiamo una coppia di equazioni:

$$\begin{cases} j_n = q\mu_n n(x)E - qD_n \frac{\partial n}{\partial x} \\ j_p = q\mu_p p(x)E - qD_p \frac{\partial p}{\partial x} \end{cases}$$

dove il pedice  $n$  identifica gli elettroni e il pedice  $p$  le lacune.

Queste sono note come equazioni di deriva/diffusione (*drift/diffusion*).

# 5.4 EQUAZIONI DI DERIVA-DIFFUSIONE

## 5.4.1 Equazione di diffusione

L'estensione per il caso 3D:

$$\begin{cases} \vec{j}_n = q\mu_n n \vec{E} - eD_n \vec{\nabla} n \\ \vec{j}_p = q\mu_p p \vec{E} - eD_p \vec{\nabla} p \end{cases}$$

Sebbene nella derivazione di queste due espressioni non sia stata fatta alcuna ipotesi diretta sulla funzione di distribuzione di non equilibrio  $f(v, x)$ , in effetti, la scelta della velocità di equilibrio (termica) significa che le equazioni di deriva/diffusione sono valide solo per perturbazioni molto piccole dello stato di equilibrio (campi bassi).

La validità delle equazioni di deriva/diffusione viene estesa empiricamente introducendo la mobilità dipendente dal campo  $\mu(E)$  e il coefficiente di diffusione  $D(E)$ , ottenuti da modelli empirici o calcoli dettagliati.

Le equazioni di deriva/diffusione vanno accoppiate con altri due set di equazioni, l'equazione di continuità e l'equazione di Poisson.



# 5.4 EQUAZIONI DI DERIVA-DIFFUSIONE

## 5.4.2 Equazione di continuità

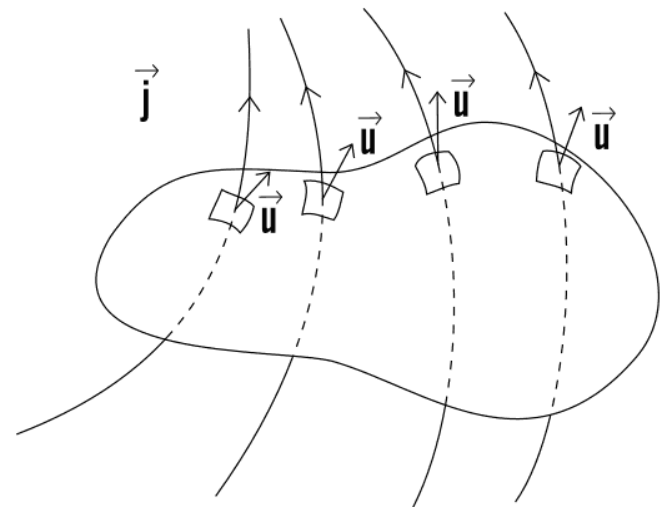
L'intensità di corrente  $i$  è legata alla densità di corrente elettrica da un'equazione integrale. Sappiamo infatti che l'intensità di corrente equivale al flusso del vettore densità di corrente  $\vec{j}(\vec{r}, t)$  attraverso una superficie aperta  $S$  del semiconduttore:

$$i = \Phi_S(\vec{j}) = \int_S \vec{j} \cdot \vec{u} dS$$

dove  $\vec{u}$  è il versore perpendicolare alla superficie in ogni suo punto. Consideriamo adesso una superficie chiusa.

Supponiamo che il vettore  $\vec{u}$  sia sempre perpendicolare alla superficie in ogni suo punto e che sia sempre diretto verso l'esterno della superficie.

Come si vede, le cariche possono entrare o uscire dalla superficie chiusa e quindi la quantità di carica totale  $Q_{int}$  presente al suo interno può variare nel tempo.



Intensità di corrente come flusso della densità di corrente attraverso una superficie chiusa del conduttore.

# 5.4 EQUAZIONI DI DERIVA-DIFFUSIONE

## 5.4.2 Equazione di continuità

La variazione nel tempo della carica elettrica all'interno della superficie chiusa equivale al flusso della densità di corrente attraverso la superficie chiusa considerata:

$$\Phi_S(\vec{j}) = \frac{dQ_{int}}{dt}$$

con  $S$  superficie chiusa.

Ricordano la definizione di flusso ed esprimendo la carica totale come integrale della densità di carica volumetrica:

$$\oint_S \vec{j} \cdot \vec{u} dS = \frac{d}{dt} \int_V \rho dV$$

Applicando il teorema della divergenza:

$$\oint_S \vec{j} \cdot \vec{u} dS = \int_V \vec{\nabla} \cdot \vec{j} dV$$

e quindi:

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho dV = \int_V \vec{\nabla} \cdot \vec{j} dV$$

# 5.4 EQUAZIONI DI DERIVA-DIFFUSIONE

## 5.4.2 Equazione di continuità

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho dV = \int_V \vec{\nabla} \cdot \vec{j} dV$$

Portiamo l'operazione di derivata nell'operazione di integrale:

$$\int_V \frac{d\rho}{dt} dV = \int_V \vec{\nabla} \cdot \vec{j} dV$$

Poiché deve valere per ogni volume di integrazione  $V$ , l'uguaglianza tra gli integrali deve essere soddisfatta anche tra le funzioni integrande, e quindi:

$$\frac{d\rho}{dt} = \vec{\nabla} \cdot \vec{j}$$

Questa è l'equazione di continuità, nella sua forma generale.

Nel caso di semiconduttori, l'equazione si modifica andando ad aggiungere fenomenologicamente una rate netta di generazione/ricombinazione  $U$  per i portatori  $n$  e  $p$ :

$$\begin{cases} \frac{dn}{dt} = \frac{1}{q} \vec{\nabla} \cdot \vec{j}_n + U_n \\ \frac{dp}{dt} = \frac{1}{q} \vec{\nabla} \cdot \vec{j}_p + U_p \end{cases}$$

# 5.4 EQUAZIONI DI DERIVA-DIFFUSIONE

## 5.4.3 Equazione di Poisson

L'equazione di Poisson è ricavabile a partire dal teorema di Gauss in forma differenziale:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = \frac{\rho}{\varepsilon}$$

unendola con l'espressione che lega il campo elettrico con il potenziale elettrico  $V$  di una distribuzione di cariche  $\vec{E} = -\vec{\nabla}V$ :  $\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = -\vec{\nabla} \cdot (\vec{\nabla}V) = -\vec{\nabla}^2V$

da cui:

$$\vec{\nabla}^2V = \frac{\rho}{\varepsilon} = \frac{q(n - p + N_A - N_D)}{\varepsilon}$$

Riepiloghiamo le equazioni da risolvere sono:

$$\begin{cases} \vec{J}_n = q\mu_n n \vec{E} - eD_n \vec{\nabla}n \\ \vec{J}_p = q\mu_p p \vec{E} - eD_p \vec{\nabla}p \end{cases}$$

$$\begin{cases} \frac{dn}{dt} = \frac{1}{q} \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_n + U_n \\ \frac{dp}{dt} = \frac{1}{q} \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_p + U_p \end{cases}$$

$$\vec{\nabla}^2V = \frac{\rho}{\varepsilon} = \frac{q(n - p + N_A - N_D)}{\varepsilon}$$

# 5.5 SOLUZIONE DI UN SISTEMA DI EQUAZIONI: METODO DEGLI ELEMENTI FINITI

## 5.5.1 Introduzione al metodo degli elementi finiti

Come si risolve questo sistema di equazioni in un volume definito?

Questo tipo di problemi sono classificati come “**problemi vincolati al contorno**”.

Mentre i problemi di Cauchy possono essere visti come problemi di tipo temporale, in quanto vengono imposte condizioni iniziali e si studia l'evolvere dell'equazione nel tempo, i problemi al contorno possono essere visti come problemi di tipo spaziale, con condizioni sul bordo del dominio su cui è definita l'equazione differenziale coinvolta nel problema.

Le condizioni al contorno sono anche dette condizioni al bordo o **condizioni di Dirichlet**.

I problemi vincolati al contorno possono essere risolti analiticamente ottenendo soluzioni esatte quando il contorno del dominio e la distribuzione delle sorgenti sono semplici.

Nei casi in cui il contorno del dominio e la distribuzione delle sorgenti è complessa, tali problemi possono essere risolti in modo approssimato mediante metodi numerici. La tecnica principale impiegata per questo scopo è il metodo degli elementi finiti (FEM).

Il metodo degli elementi finiti è una procedura numerica utilizzata per trasformare un sistema di equazioni differenziali che governano un sistema continuo in un sistema di equazioni algebriche con un numero finito di incognite.

# 5.5 SOLUZIONE DI UN SISTEMA DI EQUAZIONI: METODO DEGLI ELEMENTI FINITI

## 5.5.1 Introduzione al metodo degli elementi finiti

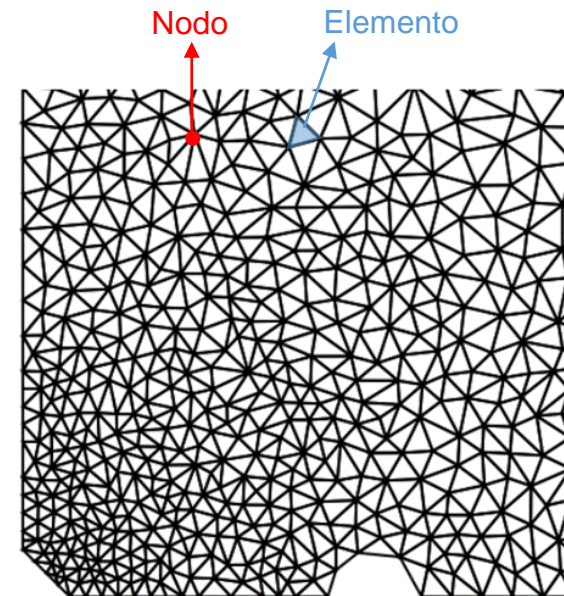
Lo sviluppo dei metodi numerici è stato, ed è favorito, dalla crescita rapidissima della “potenzialità di calcolo” dei computer.

I passi fondamentali per un’analisi FEM sono:

- il dominio è suddiviso (discretizzato) in sottodomini di forma semplice
- l’equazione differenziale alle derivate parziali è sostituita con un sistema di equazioni algebriche per ogni sottodominio

La discretizzazione di un assegnato dominio in elementi fra loro connessi in un numero finito di punti (nodi), vertici degli elementi, in corrispondenza dei quali sono valutate le componenti della funzione incognita.

L’analisi FEM fornisce un metodo per la risoluzione numerica di una equazione differenziale, sia essa alle derivate totali o parziali.



# 5.5 SOLUZIONE DI UN SISTEMA DI EQUAZIONI: METODO DEGLI ELEMENTI FINITI

## 5.5.1 Introduzione al metodo degli elementi finiti

Più precisamente si tratta di un metodo per approssimare una equazione differenziale con un sistema di equazioni algebriche.

L'idea di base è di risolvere il sistema di equazioni lineari all'interno di un elemento per poi calcolare il valore dell'equazione nei nodi, così da passare l'informazione all'elemento consecutivo, dove verrà risolto nuovamente il sistema di equazioni a partire dal valore assunto ai nodi, che costituiranno le "condizioni al contorno" per l'elemento.

Le equazioni algebriche legano i valori che la funzione incognita assume nei nodi dei sottodomini creati con la discretizzazione. Le relazioni algebriche forniscono una rappresentazione tanto più accurata della funzione incognita quanto più spinta è la discretizzazione fatta, cioè quanto maggiore è il numero dei nodi.

Con l'implementazione in un codice di algoritmi iterativi, relativamente semplici, è possibile determinare soluzioni quasi "esatte", ossia con una approssimazione accettabile, di problemi molto complessi, altrimenti non ottenibili per altra via, e con tempi di calcolo sensibilmente ridotti.

# 5.5 SOLUZIONE DI UN SISTEMA DI EQUAZIONI: METODO DEGLI ELEMENTI FINITI

## 5.5.1 Introduzione al metodo degli elementi finiti

Con questa metodologia è possibile risolvere problemi i cui modelli analitici descritti con un sistema di equazioni alle derivate non presentano una soluzione.

Per la sua varietà di impiego e duttilità quale strumento di analisi è attualmente utilizzato nelle Università e nelle Industrie in tutto il mondo, grazie anche allo sviluppo dei software commerciali:





# 5.5 SOLUZIONE DI UN SISTEMA DI EQUAZIONI: METODO DEGLI ELEMENTI FINITI

## 5.5.2 Discretizzazione di un dominio

La discretizzazione del dominio continuo  $\Omega$  racchiuso da un contorno vincolato  $\Sigma$  di partenza in un dominio discreto (mesh) avviene mediante l'uso di primitive (elementi finiti) di forma semplice.

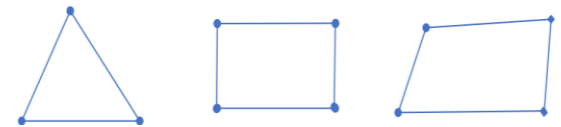
Per il perfetto ricoprimento della regione spaziale in esame le primitive possono avere dimensioni diverse. Inoltre non è necessario che le caratteristiche costitutive del materiale (permettività, resistività, permeabilità) siano omogenee per tutti gli elementi.

La precisione dei risultati dipende anche dal tipo e dalla forma dell'elemento usato.

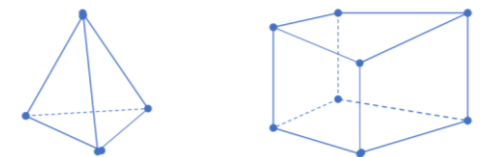
• *Tratti lineari*.... per domini *1D*



• *Triangoli, rettangoli e quadrilateri* etc .... per domini *2D*



• *Tetraedri, esaedri, ottaedri, dodecaedro* etc ..... per domini *3D*



# 5.5 SOLUZIONE DI UN SISTEMA DI EQUAZIONI: METODO DEGLI ELEMENTI FINITI

## 5.5.2 Discretizzazione di un dominio

La funzione soluzione è approssimata, e non necessariamente i valori che essa assume nei nodi del reticolo sono i valori esatti della funzione, ma sono quelli che forniranno il minor errore su tutta la soluzione.

Il metodo degli elementi finiti, qualunque sia il problema che si voglia risolvere, si basa sempre sulle seguenti fasi fondamentali:

### Fase di Pre-Processing

- Suddividere il dominio di analisi del problema in un numero finito di elementi
- Determinare l'equazione che descrive il fenomeno fisico del problema
- Scrivere le equazioni che caratterizzano un elemento
- Assemblare tra loro gli elementi
- Applicare le condizioni al contorno e i carichi

### Fase di Solution

- Risolvere il sistema algebrico di equazioni lineari o non lineari per ricavare il valore della funzione incognita nei nodi degli elementi

### Fase di Post-Processing

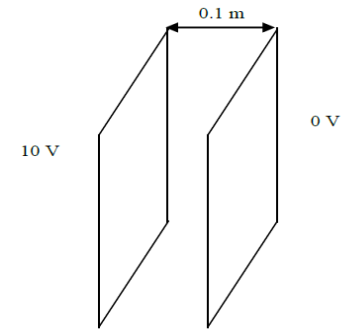
- Ottenere altre informazioni sul problema

# 5.5 SOLUZIONE DI UN SISTEMA DI EQUAZIONI: METODO DEGLI ELEMENTI FINITI

## 5.5.3 Esempio semplice di applicazione del metodo FEM

Calcolare la distribuzione di potenziale e del campo elettrico tra le armature di un condensatore piano, distanti 10 cm, sulle quali sia applicata una differenza di potenziale di 10V.

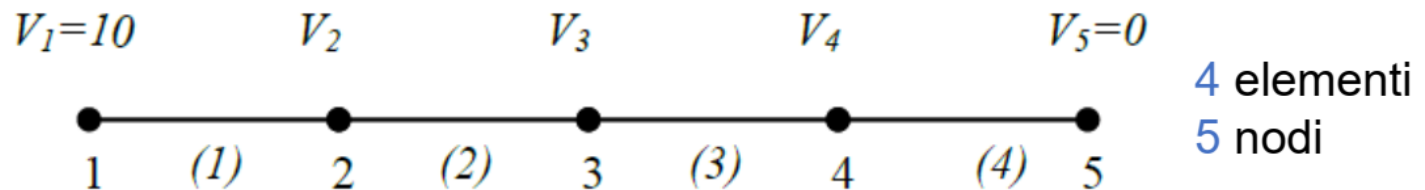
Si faccia l'ipotesi che il dielettrico tra le armature sia lineare, omogeneo e isotropo.



### Fase di Pre-Processing

- **Suddividere il dominio di analisi del problema in un numero finito di elementi.**

Il sistema fisico può essere semplificato come un modello monodimensionale discretizzato secondo il seguente schema:



# 5.5 SOLUZIONE DI UN SISTEMA DI EQUAZIONI: METODO DEGLI ELEMENTI FINITI

## 5.5.3 Esempio semplice di applicazione del metodo FEM

- **Determinare l'equazione che descrive il fenomeno fisico del problema.**

L'equazione differenziale da risolvere è quella di Poisson:

$$\vec{\nabla}^2 V = \frac{\rho}{\varepsilon}$$

Se supponiamo che non ci sia carica tra le armature:  $\vec{\nabla}^2 V = 0$

Poiché abbia ridotto il problema ad una sola dimensione:

$$\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} = 0$$

- **Scrivere le equazioni che caratterizzano un elemento i-esimo.**

Supponiamo che i singoli elementi siano così piccoli da poter sviluppare in serie di Taylor la derivata seconda attorno ad un valore infinitesimo  $\pm h$  rispetto al valore assunto dalla funzione in  $x$  all'interno dell'elemento.

# 5.5 SOLUZIONE DI UN SISTEMA DI EQUAZIONI: METODO DEGLI ELEMENTI FINITI

## 5.5.3 Esempio semplice di applicazione del metodo FEM

Si ha che (trascurando gli elementi di ordine superiore al secondo):

$$V(x + h) = V(x) + h \frac{\partial V(x)}{\partial x} + \frac{h^2}{2} \frac{\partial^2 V(x)}{\partial x^2}$$

Analogamente:

$$V(x - h) = V(x) - h \frac{\partial V(x)}{\partial x} + \frac{h^2}{2} \frac{\partial^2 V(x)}{\partial x^2}$$

Sommando membro a membro:

$$\frac{\partial^2 V(x)}{\partial x^2} = \frac{V(x + h) - 2V(x) + V(x - h)}{h^2}$$

Applicando l'equazione di Poisson per un singolo elemento, deve essere che all'interno dell'elemento  $\frac{\partial^2 V(x)}{\partial x^2} = 0$  e quindi:

$$V(x) = \frac{V(x + h) + V(x - h)}{2}$$

# 5.5 SOLUZIONE DI UN SISTEMA DI EQUAZIONI: METODO DEGLI ELEMENTI FINITI

## 5.5.3 Esempio semplice di applicazione del metodo FEM

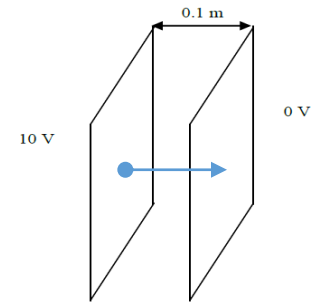
$$V(x) = \frac{V(x+h) + V(x-h)}{2}$$

Per ogni punto  $x$  all'interno dell'elemento  $i$ -esimo, la  $V(x)$  è il valor medio tra i valori assunti dalla funzione stessa nei due estremi in un intorno sufficientemente piccolo.

In altre parole,  $V(x)$  è una retta:

$$V(x) = -mx + a$$

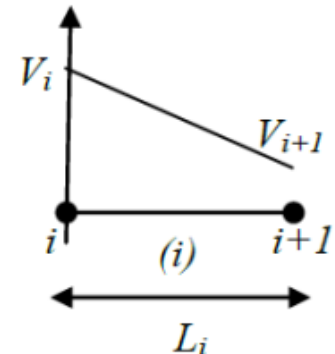
Abbiamo esplicitato direttamente il segno meno perché la funzione  $V(x)$ , considerando i valori al contorno, deve essere per forza una funzione decrescente.



Consideriamo ora l'  $i$ -esimo elemento di lunghezza  $L_i = x_{i+1} - x_i$

Scriviamo l'espressione della  $V_i(x)$  nei due estremi dell'elemento  $i$ -esimo:

$$\begin{cases} V_i = -mx_i + a \\ V_{i+1} = -mx_{i+1} + a \end{cases}$$



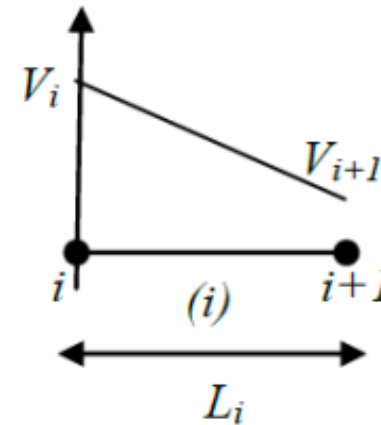
# 5.5 SOLUZIONE DI UN SISTEMA DI EQUAZIONI: METODO DEGLI ELEMENTI FINITI

## 5.5.3 Esempio semplice di applicazione del metodo FEM

$$\begin{cases} V_i = -mx_i + a \\ V_{i+1} = -mx_{i+1} + a \end{cases}$$

Sottraendo membro a membro si ottiene

$$m = \frac{V_i - V_{i+1}}{x_{i+1} - x_i}$$



Sostituendo in una delle due equazioni, è facile ricavare:

$$a = \frac{x_{i+1}V_i - x_iV_{i+1}}{x_{i+1} - x_i}$$

Ne segue che l'espressione generale del potenziale  $V(x)$  all'interno dell'elemento  $i$ -esimo sarà:

$$V(x) = -mx + a = -\left(\frac{V_i - V_{i+1}}{x_{i+1} - x_i}\right)x + \frac{x_{i+1}V_i - x_iV_{i+1}}{x_{i+1} - x_i}$$

# 5.5 SOLUZIONE DI UN SISTEMA DI EQUAZIONI: METODO DEGLI ELEMENTI FINITI

## 5.5.3 Esempio semplice di applicazione del metodo FEM

$$V(x) = -mx + a = -\left(\frac{V_i - V_{i+1}}{x_{i+1} - x_i}\right)x + \frac{x_{i+1}V_i - x_iV_{i+1}}{x_{i+1} - x_i}$$

che può essere facilmente riscritta come:

$$V(x) = \left(\frac{x_{i+1} - x}{x_{i+1} - x_i}\right)V_i + \left(\frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i}\right)V_{i+1}$$

Le funzioni

$$\begin{cases} \alpha_i = \frac{x_{i+1} - x}{x_{i+1} - x_i} = \frac{x_{i+1} - x}{L_i} \\ \alpha_{i+1} = \frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i} = \frac{x - x_i}{L_i} \end{cases}$$

sono dette funzioni di forma.

In forma compatta, scriviamo:

$$V(x) = \alpha_i V_i + \alpha_{i+1} V_{i+1}$$



# 5.5 SOLUZIONE DI UN SISTEMA DI EQUAZIONI: METODO DEGLI ELEMENTI FINITI

## 5.5.3 Esempio semplice di applicazione del metodo FEM

$$V(x) = \alpha_i V_i + \alpha_{i+1} V_{i+1}$$

Per poter procedere, abbiamo bisogno di accoppiare un'altra equazione.

Applichiamo il **principio variazionale**.

Secondo il principio variazionale in un sistema isolato le configurazioni di equilibrio sono quelle e solo quelle per le quali è minima l'energia  $W$  immagazzinata o dissipata nel sistema stesso (funzionale).

In elettrostatica, in una regione  $\Omega$  priva di cariche, l'energia immagazzinata è pari a:

$$W = \int_{\Omega} \frac{1}{2} \varepsilon |E|^2 d\tau$$

Tale punto di minimo viene identificato attraverso l'annullamento del differenziale dell'energia potenziale:

$$dW = 0$$

Sostituendo l'espressione approssimata per il potenziale  $i$ -esimo all'interno del funzionale:

$$W_i = \frac{1}{2} \varepsilon \int_{x_i}^{x_{i+1}} |E_i|^2 dx$$

# 5.5 SOLUZIONE DI UN SISTEMA DI EQUAZIONI: METODO DEGLI ELEMENTI FINITI

## 5.5.3 Esempio semplice di applicazione del metodo FEM

$$W_i = \frac{1}{2} \varepsilon \int_{x_i}^{x_{i+1}} |E_i|^2 dx$$

Usiamo la relazione tra potenziale e campo elettrico in assenza di cariche:

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}V$$

che per il caso unidimensionale diventa:

$$E = -\frac{\partial V}{\partial x}$$

Quindi:

$$W_i = \frac{1}{2} \varepsilon \int_{x_i}^{x_{i+1}} \left( \frac{\partial V}{\partial x} \right)^2 dx$$

Sostituendo l'espressione trovata prima per  $V(x)$ :

$$V(x) = \alpha_i V_i + \alpha_{i+1} V_{i+1}$$

$$W_i = \frac{1}{2} \varepsilon \int_{x_i}^{x_{i+1}} \left( V_i \frac{\partial \alpha_i}{\partial x} + V_{i+1} \frac{\partial \alpha_{i+1}}{\partial x} \right)^2 dx$$

# 5.5 SOLUZIONE DI UN SISTEMA DI EQUAZIONI: METODO DEGLI ELEMENTI FINITI

## 5.5.3 Esempio semplice di applicazione del metodo FEM

$$W_i = \frac{1}{2} \varepsilon \int_{x_i}^{x_{i+1}} \left( V_i \frac{\partial \alpha_i}{\partial x} + V_{i+1} \frac{\partial \alpha_{i+1}}{\partial x} \right)^2 dx$$

Calcoliamo le derivate:

$$\frac{\partial \alpha_i}{\partial x} = -\frac{1}{L_i} \quad \frac{\partial \alpha_{i+1}}{\partial x} = \frac{1}{L_i}$$

$$\begin{cases} \alpha_i = \frac{x_{i+1} - x}{L_i} \\ \alpha_{i+1} = \frac{x - x_i}{L_i} \end{cases}$$

Quindi:

$$W_i = \frac{1}{2} \varepsilon \int_{x_i}^{x_{i+1}} \left[ V_i \left( -\frac{1}{L_i} \right) + V_{i+1} \left( \frac{1}{L_i} \right) \right]^2 dx$$

Sviluppiamo il quadrato

$$W_i = \frac{1}{2} \varepsilon \int_{x_i}^{x_{i+1}} \left( \frac{V_i^2}{L_i^2} - 2 \frac{V_i V_{i+1}}{L_i^2} + \frac{V_{i+1}^2}{L_i^2} \right) dx$$

# 5.5 SOLUZIONE DI UN SISTEMA DI EQUAZIONI: METODO DEGLI ELEMENTI FINITI

## 5.5.3 Esempio semplice di applicazione del metodo FEM

$$W_i = \frac{1}{2} \varepsilon \int_{x_i}^{x_{i+1}} \left( \frac{V_i^2}{L_i^2} - 2 \frac{V_i V_{i+1}}{L_i^2} + \frac{V_{i+1}^2}{L_i^2} \right) dx$$

Eseguiamo l'operazione di integrazione:

$$W_i = \frac{1}{2} \varepsilon \left( \frac{V_i^2}{L_i^2} - 2 \frac{V_i V_{i+1}}{L_i^2} + \frac{V_{i+1}^2}{L_i^2} \right) L_i$$

ovvero:

$$W_i = \frac{1}{2} \varepsilon \frac{1}{L_i} (V_i^2 - 2V_i V_{i+1} + V_{i+1}^2)$$

Questa espressione può essere ricondotta ad una forma matriciale, utile perché l'indice  $i$  varia con passo discreto di 1.

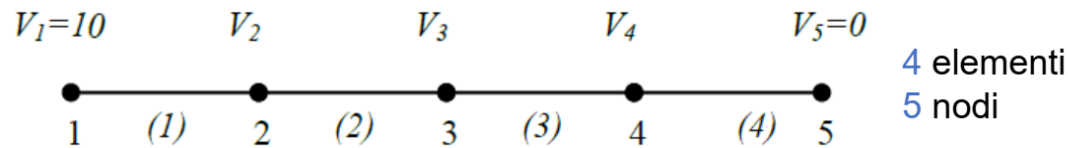
$$W_i = \frac{1}{2} \varepsilon [V_i \quad V_{i+1}] \frac{1}{L_i} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V_i \\ V_{i+1} \end{bmatrix}$$

La matrice  $\frac{1}{L_i} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}$  prende il nome di matrice di rigidezza dell'elemento  $i$ -esimo.

# 5.5 SOLUZIONE DI UN SISTEMA DI EQUAZIONI: METODO DEGLI ELEMENTI FINITI

## 5.5.3 Esempio semplice di applicazione del metodo FEM

- Assemblare tra loro gli elementi.



Scriviamo la matrice di rigidezza per ogni elemento  $i$ -esimo e poi sommiamole tra loro.

Sommiamo le matrici di rigidezza per i primi due elementi.

Poiché il vettore dei  $V_i$  sarà a tre componenti perché coinvolgerà le due coppie  $(V_1 \quad V_2)$  e  $(V_2 \quad V_3)$  occorre scrivere le matrici di rigidezza nella forma 3x3.

La matrice di rigidezza del primo elemento sarà:

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{L_1} & -\frac{1}{L_1} & 0 \\ -\frac{1}{L_1} & \frac{1}{L_1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

La matrice di rigidezza del secondo elemento sarà:

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{L_2} & -\frac{1}{L_2} \\ 0 & -\frac{1}{L_2} & \frac{1}{L_2} \end{bmatrix}$$

# 5.5 SOLUZIONE DI UN SISTEMA DI EQUAZIONI: METODO DEGLI ELEMENTI FINITI

## 5.5.3 Esempio semplice di applicazione del metodo FEM

Quindi la combinazione tra le due matrici sarà la somma:

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{L_1} & -\frac{1}{L_1} & 0 \\ -\frac{1}{L_1} & \frac{1}{L_1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{L_2} & -\frac{1}{L_2} \\ 0 & -\frac{1}{L_2} & \frac{1}{L_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{L_1} & -\frac{1}{L_1} & 0 \\ -\frac{1}{L_1} & \frac{1}{L_1} + \frac{1}{L_2} & -\frac{1}{L_2} \\ 0 & -\frac{1}{L_2} & \frac{1}{L_2} \end{bmatrix}$$

Ripetendo questa procedura anche per le altre coppie  $(V_3 \quad V_4)$  e  $(V_4 \quad V_5)$ , è facile dimostrare che la matrice di rigidezza risultante sarà:

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{L_1} & -\frac{1}{L_1} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{L_1} & \frac{1}{L_1} + \frac{1}{L_2} & -\frac{1}{L_2} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{L_2} & \frac{1}{L_2} + \frac{1}{L_3} & -\frac{1}{L_3} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{L_3} & \frac{1}{L_3} + \frac{1}{L_4} & -\frac{1}{L_4} \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{L_4} & \frac{1}{L_4} \end{bmatrix}$$

# 5.5 SOLUZIONE DI UN SISTEMA DI EQUAZIONI: METODO DEGLI ELEMENTI FINITI

## 5.5.3 Esempio semplice di applicazione del metodo FEM

E quindi l'energia in forma matriciale sarà:

$$W_i = \frac{1}{2} \varepsilon [V_i \quad V_{i+1}] \frac{1}{L_i} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V_i \\ V_{i+1} \end{bmatrix}$$

$$W = \frac{1}{2} \varepsilon [V_1 \quad V_2 \quad V_3 \quad V_4 \quad V_5] \begin{bmatrix} \frac{1}{L_1} & -\frac{1}{L_1} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{L_1} & \frac{1}{L_1} + \frac{1}{L_2} & -\frac{1}{L_2} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{L_2} & \frac{1}{L_2} + \frac{1}{L_3} & -\frac{1}{L_3} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{L_3} & \frac{1}{L_3} + \frac{1}{L_4} & -\frac{1}{L_4} \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{L_4} & \frac{1}{L_4} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V_1 \\ V_2 \\ V_3 \\ V_4 \\ V_5 \end{bmatrix}$$

In forma compatta:

$$W = \frac{1}{2} \varepsilon \cdot V^T K V$$

# 5.5 SOLUZIONE DI UN SISTEMA DI EQUAZIONI: METODO DEGLI ELEMENTI FINITI

## 5.5.3 Esempio semplice di applicazione del metodo FEM

$$W = \frac{1}{2} \varepsilon \cdot V^T K V$$

Applichiamo il metodo variazionale. Occorre minimizzare  $W$  rispetto alla matrice  $V$ .  
Quindi:

$$\frac{\partial W}{\partial V} = \frac{1}{2} \varepsilon \cdot 2KV = 0$$

ovvero:

$$KV = 0$$

E' un sistema di equazioni lineari.

L'applicazione delle condizioni al contorno permette la risoluzione del sistema di equazioni che potrà essere eseguita tramite una procedura automatica.

$$\begin{cases} KV = 0 \\ V_1 = 10 \\ V_5 = 0 \end{cases}$$



# 5.5 SOLUZIONE DI UN SISTEMA DI EQUAZIONI: METODO DEGLI ELEMENTI FINITI

## 5.5.3 Esempio semplice di applicazione del metodo FEM

Quindi:

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{L_1} & -\frac{1}{L_1} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{L_1} & \frac{1}{L_1} + \frac{1}{L_2} & -\frac{1}{L_2} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{L_2} & \frac{1}{L_2} + \frac{1}{L_3} & -\frac{1}{L_3} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{L_3} & \frac{1}{L_3} + \frac{1}{L_4} & -\frac{1}{L_4} \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{L_4} & \frac{1}{L_4} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V_1 \\ V_2 \\ V_3 \\ V_4 \\ V_5 \end{bmatrix} = 0$$

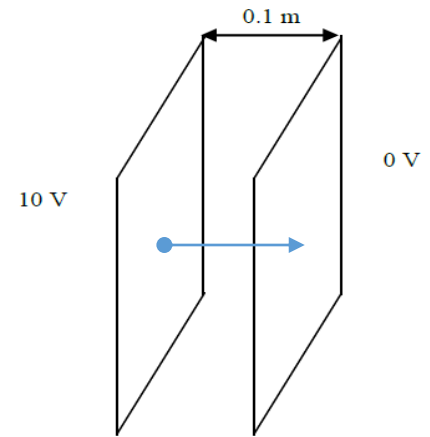
Considerando che  $V_1$  e  $V_5$  sono note, è possibile riscriverla come:

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{L_1} + \frac{1}{L_2} & -\frac{1}{L_2} & 0 \\ -\frac{1}{L_2} & \frac{1}{L_2} + \frac{1}{L_3} & -\frac{1}{L_3} \\ 0 & -\frac{1}{L_3} & \frac{1}{L_3} + \frac{1}{L_4} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V_2 \\ V_3 \\ V_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{V_1}{L_1} \\ 0 \\ \frac{V_5}{L_4} \end{bmatrix}$$

# 5.5 SOLUZIONE DI UN SISTEMA DI EQUAZIONI: METODO DEGLI ELEMENTI FINITI

## 5.5.3 Esempio semplice di applicazione del metodo FEM

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{L_1} + \frac{1}{L_2} & -\frac{1}{L_2} & 0 \\ -\frac{1}{L_2} & \frac{1}{L_2} + \frac{1}{L_3} & -\frac{1}{L_3} \\ 0 & -\frac{1}{L_3} & \frac{1}{L_3} + \frac{1}{L_4} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V_2 \\ V_3 \\ V_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{V_1}{L_1} \\ 0 \\ \frac{V_5}{L_4} \end{bmatrix}$$

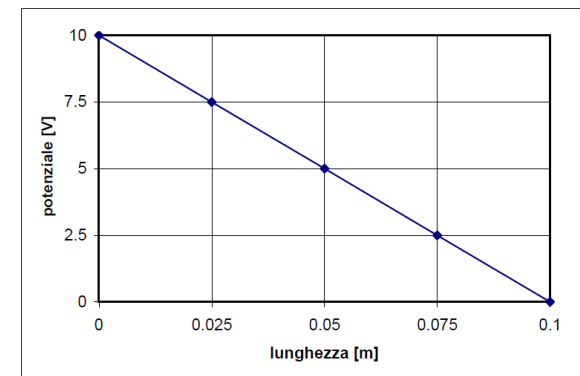


Se supponiamo che  $L_i = 0.025 \text{ m}$ , la matrice diventa:

$$\begin{bmatrix} 80 & -40 & 0 \\ -40 & 80 & -40 \\ 0 & -40 & 80 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V_2 \\ V_3 \\ V_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 400 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

- **Risolvere il sistema algebrico di equazioni lineari (o non lineari) per ricavare il valore del potenziale nei nodi degli elementi.**

$$\begin{bmatrix} V_2 \\ V_3 \\ V_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 7.5 \\ 5 \\ 2.5 \end{bmatrix}$$



# 5.5 SOLUZIONE DI UN SISTEMA DI EQUAZIONI: METODO DEGLI ELEMENTI FINITI

## 5.5.3 Esempio semplice di applicazione del metodo FEM

- Ottenere altre importanti informazioni sul problema.

Possiamo determinare il campo elettrico tra le armature, partendo da:

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}V$$

che per il caso unidimensionale diventa:

$$E = -\frac{\partial V}{\partial x}$$

Nel nostro caso:

$$E = \frac{V_1 - V_2}{L_1} = \frac{V_2 - V_3}{L_2} = \frac{2.5}{0.025} = 100 \frac{V}{m}$$

In definitiva, per poter risolvere il problema, abbiamo accoppiato tra di loro 3 equazioni:

$$\begin{cases} \vec{\nabla}^2 V = 0 \\ dW = 0 \\ \vec{E} = -\vec{\nabla}V \end{cases}$$

# 5.5 SOLUZIONE DI UN SISTEMA DI EQUAZIONI: METODO DEGLI ELEMENTI FINITI

## 5.5.4 Metodo FEM per le equazioni di deriva-diffusione: limiti fisici

Ritorniamo alla risoluzione delle equazioni di deriva-diffusione

$$\begin{cases} \vec{J}_n = q\mu_n n \vec{E} - eD_n \vec{\nabla} n \\ \vec{J}_p = q\mu_p p \vec{E} - eD_p \vec{\nabla} p \end{cases}$$

$$\begin{cases} \frac{dn}{dt} = \frac{1}{q} \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_n + U_n \\ \frac{dp}{dt} = \frac{1}{q} \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_p + U_p \end{cases}$$

$$\vec{\nabla}^2 V = \frac{\rho}{\varepsilon} = \frac{q(n - p + N_A - N_D)}{\varepsilon}$$

Uno schema numerico che risolve le equazioni dovrebbe:

1. Conservare il numero totale di particelle all'interno della regione simulata.
2. Rispettare il segno di carica della densità dei portatori.
3. Rispettare la monotonia della soluzione (cioè non deve introdurre oscillazioni spaziali spurie).

# 5.5 SOLUZIONE DI UN SISTEMA DI EQUAZIONI: METODO DEGLI ELEMENTI FINITI

## 5.5.4 Metodo FEM per le equazioni di deriva-diffusione: limiti fisici

Per applicare il metodo FEM il dominio computazionale è suddiviso in elementi.

Le correnti vengono quindi definite sui confini di questi elementi, imponendo così la conservazione (la corrente che esce da un lato dell'elemento è esattamente uguale alla corrente che entra nell'elemento vicino attraverso il lato in comune).

Ad esempio, su una griglia 2D uniforme con dimensione della maglia  $\Delta$ , l'equazione di continuità elettronica potrebbe essere discretizzata in una forma esplicita come segue:

$$\frac{dn}{dt} = \frac{1}{q} \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_n + U_n$$

$$\frac{n(i, j; k + 1) - n(i, j, k)}{\Delta t} = \frac{J^x \left( i + \frac{1}{2}, j; k \right) - J^x \left( i - \frac{1}{2}, j; k \right)}{q\Delta} + \frac{J^y \left( i, j + \frac{1}{2}; k \right) - J^y \left( i, j - \frac{1}{2}; k \right)}{q\Delta} + U(i, j; k)$$

Quando le equazioni vengono discretizzate, utilizzando ad esempio le differenze finite, ci sono limitazioni sulla scelta della dimensione della mesh e del passo temporale:

# 5.5 SOLUZIONE DI UN SISTEMA DI EQUAZIONI: METODO DEGLI ELEMENTI FINITI

## 5.5.4 Metodo FEM per le equazioni di deriva-diffusione: limiti fisici

1. La dimensione della maglia  $\Delta x$  è limitata dalla lunghezza del Debye.

La dimensione dell'elemento deve essere inferiore alla lunghezza di Debye.

Un semplice esempio è la redistribuzione dei portatori all'interfaccia tra due regioni con diversi livelli di doping.

I portatori si diffondono nella regione drogata inferiore creando una distribuzione di portatori in eccesso che all'equilibrio decade nello spazio con un comportamento approssimativamente esponenziale.

La costante di decadimento spaziale è la lunghezza di Debye:

$$L_D = \sqrt{\frac{\epsilon k_B T}{q^2 N}}$$

dove  $N$  è il livello di drogaggio,  $\epsilon$  è la costante dielettrica del semiconduttore,  $k_B$  la costante di Boltzmann e  $T$  la temperatura.

Nel GaAs e Si, a temperatura ambiente la lunghezza di Debye è di circa 400 Å quando  $N \approx 10^{16} \text{ cm}^{-3}$  e diminuisce a circa solo 50 Å quando  $N \approx 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ .

# 5.5 SOLUZIONE DI UN SISTEMA DI EQUAZIONI: METODO DEGLI ELEMENTI FINITI

## 5.5.4 Metodo FEM per le equazioni di deriva-diffusione: limiti fisici

2. L'intervallo temporale è limitato dal tempo di rilassamento dielettrico.

Genericamente, il termine rilassamento definisce un fenomeno per mezzo del quale un sistema perturbato tende all'equilibrio.

Nel caso di un materiale dielettrico non ideale, la polarizzazione non è in grado di seguire istantaneamente ogni variazione del campo elettrico applicato.

In particolare, si definisce rilassamento dielettrico il processo secondo il quale un materiale dielettrico sollecitato da un campo elettrico tende a raggiungere il valore di equilibrio della propria polarizzazione.

Il raggiungimento della polarizzazione di equilibrio, avviene durante un determinato intervallo temporale.

Pertanto, il fenomeno è caratterizzato da una propria costante di tempo di rilassamento dielettrico  $t_r$ .

$$t_r = \frac{\epsilon}{qN}$$

# 5.5 SOLUZIONE DI UN SISTEMA DI EQUAZIONI: METODO DEGLI ELEMENTI FINITI

## 5.5.4 Metodo FEM per le equazioni di deriva-diffusione: limiti fisici

Per comprendere l'importanza di rispettare le limitazioni legate al tempo di rilassamento dielettrico, immaginiamo di avere una fluttuazione spaziale della concentrazione dei portatori che si rilassa all'equilibrio secondo la legge:

$$\frac{\partial \Delta n}{\partial t} = - \frac{\Delta n(t = 0)}{t_r}$$

Una discretizzazione alle differenze finite di questa equazione restituisce al primo  $\Delta t$ :

$$\Delta n(\Delta t) = \Delta n(0) - \frac{\Delta t \Delta n(0)}{t_r}$$

Se  $\Delta t > t_r$ ,  $\Delta n(\Delta t) < 0$ , il che significa che la concentrazione effettiva è inferiore del valore di equilibrio.

Cosa accade per i  $\Delta t$  successivi?

$< 0 \text{ ma } > |\Delta n(\Delta t)| \text{ perché } \Delta t > t_r$

$$\Delta n(2\Delta t) = \Delta n(\Delta t) - \frac{\Delta t \Delta n(\Delta t)}{t_r} \quad \Rightarrow \quad > 0$$



# 5.5 SOLUZIONE DI UN SISTEMA DI EQUAZIONI: METODO DEGLI ELEMENTI FINITI

## 5.5.4 Metodo FEM per le equazioni di deriva-diffusione: limiti fisici

$$\Delta n(2\Delta t) = \Delta n(\Delta t) - \frac{\Delta t \Delta n(\Delta t)}{t_r} > 0$$

$$\Delta n(3\Delta t) = \underbrace{\Delta n(2\Delta t)}_{> 0} - \underbrace{\frac{\Delta t \Delta n(2\Delta t)}{t_r}}_{> 0 \text{ e } > |\Delta n(\Delta t)|} \rightarrow < 0$$

E' facile intuire che la soluzione in funzione del tempo sarà oscillante tra valori positivi e negativi di  $\Delta n$ .

Un  $\Delta t$  eccessivamente grande può quindi portare a risultati non fisici.

Nel caso di elevata mobilità il tempo di rilassamento dielettrico può essere molto piccolo.

Ad esempio, un campione di GaAs con mobilità pari a  $6,000 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$  e un drogaggio di  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$  ha approssimativamente  $t_r \approx 10^{-10} \text{ s}$ , e in una simulazione, il passo temporale  $\Delta t$  dovrebbe essere scelto in modo che sia considerevolmente più piccolo.

$$t_r = \frac{\epsilon}{qN}$$