

Teoria microscopica della conduzione elettrica

Indice

1. Un modello microscopico della conduzione elettrica

1.1 Modello classico della conduzione

1.2 Interpretazione classica di v_m e di Λ

1.3 Difficoltà dell'interpretazione classica

2. Teoria quantistica della conduzione elettrica

2.1 Quantizzazione dell'energia in una buca unidimensionale

2.2 I fermioni ed il principio di esclusione di Pauli.

2.3 Energia di Fermi

2.4 Fattore di Fermi, temperatura di Fermi e velocità di Fermi

2.5 Scattering delle onde elettroniche e interpretazione quantistica della resistività

Teoria microscopica della conduzione elettrica

Il primo modello microscopico della conduzione elettrica nei metalli fu proposto da P. Drude nel 1900 e successivamente precisato negli aspetti statistici da A. Lorentz intorno al 1909.

Tale modello prevede correttamente le leggi di Ohm e la dipendenza della resistività da quantità microscopiche quali la velocità quadratica media v_{rms} degli elettroni ed il loro cammino libero medio Λ . Tuttavia, quando tali quantità vengono interpretate classicamente, il modello non riesce a fornire risultati corretti sia in relazione ai valori della resistività dei metalli sia in relazione all'andamento della resistività al variare della temperatura.

La teoria classica della conduzione, inoltre, non fornisce alcuna informazione sul perché i diversi materiali possono essere conduttori, semiconduttori ed isolanti.

Una corretta e completa interpretazione delle proprietà elettroniche dei solidi può essere ottenuta soltanto nell'ambito della teoria quantistica.

1 Un modello microscopico della conduzione elettrica

Consideriamo un metallo che immaginiamo formato da un reticolo cristallino tridimensionale. Il metallo occupa un volume V e contiene un numero N di elettroni "liberi" di muoversi attraverso il reticolo. In assenza di campo elettrico esterno gli elettroni liberi si muovono in modo casuale, proprio come le molecole di un gas all'interno di un recipiente (gas di elettroni liberi), e la corrente elettrica che attraversa il metallo è nulla. In presenza di un campo elettrico, il conduttore è attraversato da una corrente elettrica I .

Da un punto di vista macroscopico, le proprietà elettriche di un metallo possono essere descritte per mezzo delle due leggi di Ohm:

1. l'intensità di corrente elettrica è proporzionale alla ddp applicata alle estremità del metallo:

$$I = V / R \text{ o } V = R I \quad (1)$$

2. La resistenza elettrica del metallo R è indipendente dal campo elettrico ed è direttamente proporzionale alla dimensione lineare L del metallo lungo la direzione del campo e alla sua sezione S perpendicolare al campo elettrico:

$$R = \rho L / A \quad (2)$$

ρ è la resistività del metallo che, a una data temperatura, è una costante caratteristica del materiale indipendente dal valore del campo elettrico E cui è sottoposto il conduttore.

Utilizzando le leggi di Ohm ed osservando che $V = E L$, l'intensità di corrente elettrica può essere espressa nel modo seguente:

$$I = \frac{1}{\rho} E A \quad (3)$$

1.1 Modello classico della conduzione

L'intensità di corrente elettrica può essere anche espressa in termini di quantità microscopiche quali la velocità di deriva v_D degli elettroni liberi all'interno del metallo (cioè il valor medio della velocità degli elettroni lungo la direzione del campo), il numero di elettroni liberi n_e per unità di volume del metallo e la carica elettrica e dell'elettrone. Esprimendo I in funzione di tali quantità si ha:

$$I = n_e e A v_D$$

che confrontata con la (3) fornisce:

$$\rho = \frac{E}{n_e e v_D} \quad (4)$$

Poiché ρ è indipendente dal campo elettrico, quest'ultima equazione richiede che:

la velocità di deriva degli elettroni v_D risulta costante e direttamente proporzionale all'intensità E del campo elettrico.

D'altra parte un elettrone libero in presenza del campo E risente di una forza che produce un'accelerazione costante eE/m_e . Se questa fosse l'unica forza agente la velocità di deriva v_D dovrebbe aumentare costantemente e linearmente con il tempo. Pertanto, nel modello microscopico, si assume che l'elettrone venga accelerato dal campo per un breve intervallo di tempo e che quindi urti con uno ione del reticolo. La velocità dell'elettrone dopo l'urto è completamente scorrelata dal valore della v_D (come vedremo più avanti, la correttezza di tale ipotesi è giustificata dal fatto che v_D è molto più piccola delle velocità termiche degli elettroni). L'effetto complessivo di tali urti è equivalente in media ad una forza resistente proporzionale alla velocità istantanea dell'elettrone, in grado di controbilanciare l'effetto del campo e di garantire una condizione di regime di tipo stazionario.

Consideriamo, dunque, un elettrone scelto a caso e indichiamo con τ il tempo medio trascorso dall'ultima collisione dell'elettrone con il reticolo (τ coincide con il tempo di volo, cioè, con il tempo medio tra due collisioni). Poiché l'elettrone è soggetto ad un'accelerazione $a = eE/m_e$, la velocità di deriva può essere espressa come:

$$v_D = \frac{eE}{m_e} \tau \quad (5)$$

e usando l'equazione (4) possiamo scrivere:

$$\rho = \frac{m_e}{n_e e^2 \tau} \quad (6)$$

E' inoltre evidente che, se v_m indica la velocità media degli elettroni, la distanza media percorsa da un elettrone tra due urti consecutivi è:

$$\Lambda = v_m \tau$$

che sostituita nella (6) permette di esprimere la resistività del metallo in funzione di Λ e v_m , cioè:

$$\rho = \frac{m_e v_m}{n_e e^2 \Lambda} \quad (7)$$

In accordo alla legge di Ohm la resistività del metallo è indipendente dal campo elettrico. Le uniche quantità che nell'equazione precedente possono dipendere dal campo sono la velocità media v_m e il cammino libero medio Λ . Tali quantità meritano dunque un'analisi più approfondita, al fine di scoprire se esse possano o meno dipendere dal campo elettrico. Per farlo è utile precisare il significato di tali grandezze nell'ambito del modello classico, per passare successivamente alla più corretta interpretazione quantistica.

1.1 Interpretazione classica di v_m e di Λ

Nell'ambito della teoria classica della conduzione si assume che gli ioni del reticolo cristallino e gli elettroni liberi del conduttore siano governati dalla statistica di Maxwell-Boltzmann. Ciò significa che in condizioni di equilibrio alla temperatura assoluta T sia gli ioni che il gas di elettroni liberi possiedono un'energia cinetica media pari a $3/2 k T$.

Così, per esempio, a temperature ordinarie ($T \approx 300 \text{ K}$) la velocità quadratica media degli elettroni, che è di poco superiore alla loro velocità media, è:

$$v_m \approx v_{rms} = \sqrt{\frac{3kT}{m_e}} = \sqrt{\frac{3(1.28 \times 10^{-23} \text{ J/K})(300 \text{ K})}{9.11 \times 10^{-31} \text{ kg}}} = 1.17 \times 10^5 \text{ m/s}$$

Osserviamo che tale velocità è di parecchi ordini di grandezza più grande delle tipiche velocità di deriva, dell'ordine di $10^{-5} \div 10^{-4} \text{ m/s}$, cui sono soggetti gli elettroni di un metallo.

Pertanto, in condizioni ordinarie, il valore estremamente piccolo della velocità deriva non altera in alcun modo la velocità media degli elettroni, il cui valore dunque può essere considerato indipendente dal campo elettrico esterno.

Da un punto di vista classico il cammino libero medio Λ dipende dalle dimensioni degli ioni e dal numero di ioni per unità di volume n_{ion} .

Per ricavare l'espressione di Λ consideriamo un elettrone, le cui dimensioni assumeremo trascurabili, che si muove con velocità v in una regione in cui sono presenti degli ioni, che assumeremo essere sfere rigide di raggio r .

L'elettrone colliderà con uno ione se si muove lungo una traiettoria la cui distanza dal centro dello ione è minore di r .

Per ricavare il cammino libero medio consideriamo un intervallo di tempo t_1 . In tale intervallo l'elettrone copre una distanza $v t_1$. Se nel volume cilindrico $\pi r^2 v t_1$ vi è uno ione l'elettrone colliderà con esso cambiando direzione di moto (figura 1).

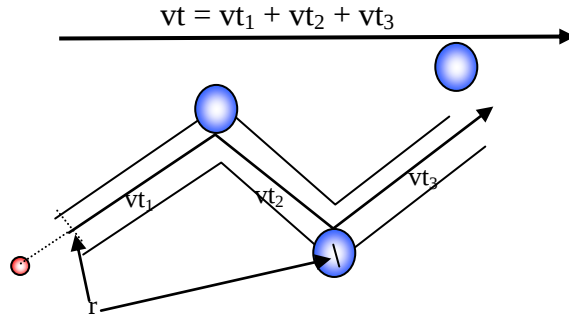


Figura 1

Analogamente in un intervallo di tempo successivo t_2 esso colliderà con un altro ione se il centro di quest'ultimo cade in un volume cilindrico $\pi r^2 v t_2$. Pertanto in un intervallo di tempo $t = t_1 + t_2 + \dots$, l'elettrone urta con tutti gli ioni i cui centri si trovano all'interno di un volume $\pi r^2 v t$. Così, se il numero di ioni per unità di volume del conduttore è n_{ion} , in un tempo t l'elettrone effettuerà un numero di collisioni pari a $n_{ion} \pi r^2 v t$, percorrendo una distanza totale $v t$. Il rapporto tra la distanza totale percorsa dall'elettrone ed il numero di urti rappresenta il cammino libero medio:

$$\Lambda = \frac{vt}{n_{ion} \pi r^2 vt} = \frac{1}{n_{ion} S} \quad (8)$$

Dove $S = \pi r^2$ è la sezione d'urto di uno ione.

Poiché né n_{ion} né S dipendono dal campo elettrico E , anche il cammino libero medio Λ risulta indipendente da E .

Riassumendo, dunque, in accordo all'interpretazione classica, poiché sia v_m che Λ non dipendono dal campo elettrico, la resistività risulta indipendente dal campo elettrico, così come previsto dalle leggi di Ohm.

1.2 Difficoltà dell'interpretazione classica

Sebbene la teoria classica della conduzione fornisca una corretta (anche se soltanto qualitativa) interpretazione delle leggi di Ohm, essa risulta in palese disaccordo con alcuni fatti sperimentali. Esaminiamo nel dettaglio i principali punti critici della teoria classica.

a. Dipendenza della resistività dalla temperatura.

E' noto che ha temperature ordinarie la resistività di un metallo cresce linearmente con la temperatura. Tale andamento non può essere riprodotto a partire dalla teoria classica della conduzione. Infatti, sostituendo l'espressione (8) per Λ nella (7), otteniamo:

$$\rho = \left(\frac{n_{ion} m_e}{n_e e^2} \right) v_m S \quad (9)$$

Da un punto di vista classico l'unica quantità che in tale espressione dipende dalla temperatura è v_m , che risulta proporzionale a $\sqrt{T}$, di modo che la resistività cresce con la radice quadrata della temperatura e non linearmente con essa.

b. Disaccordo quantitativo con i valori misurati di resistività

L'equazione (9) consente di calcolare il valore della resistività dei metalli. Utilizzando i valori noti delle quantità microscopiche che entrano nella (9) (e la distribuzione di Maxwell-Boltzmann per v_m), si trova, ad esempio, che la resistività calcolata del rame a 300 K è circa sei volte più grande di quella misurata.

2 Teoria quantistica della conduzione elettrica

La teoria classica della conduzione fallisce per diverse ragioni. In primo luogo perché la natura quantistica degli elettroni non può essere trascurata. In particolare si deve tener conto del fatto che gli elettroni non obbediscono, neanche approssimativamente, alla statistica di Maxwell-Boltzmann ma alla statistica di Fermi-Dirac. Inoltre, le interazioni tra gli elettroni e gli ioni non sono assimilabili ad un urto tra sfere rigide, in quanto implicano lo scattering di un'onda elettronica con un reticolo cristallino oscillante.

Per introdurre il modello quantistico della conduzione elettrica richiamiamo brevemente la teoria del “gas di elettroni liberi” di Fermi.

2.1 Quantizzazione dell'energia in una buca unidimensionale

Per descrivere il comportamento degli elettroni liberi in un metallo, secondo la teoria di Fermi, è opportuno considerare preliminarmente il caso unidimensionale relativo ad un singolo elettrone confinato in una buca di potenziale a pareti infinite (elettrone in una scatola).

Secondo la relazione di De Broglie, la lunghezza d'onda dell'elettrone è:

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (10)$$

essendo h la costante di Planck. Poiché l'elettrone è confinato in una “scatola” unidimensionale di dimensione L , le lunghezze d'onda possono assumere soltanto l'insieme discreto di valori:

$$\lambda_n = \frac{2L}{n} \quad (11)$$

corrispondente alla condizione di onda stazionaria.

Per la (11) ne risulta la quantizzazione del momento p e, di conseguenza, dell'energia dell'elettrone secondo la relazione:

$$E_n = \frac{p_n^2}{2m} = \frac{(h/\lambda_n)^2}{2m} = n^2 \frac{h^2}{8mL^2} \quad (12)$$

Mentre la funzione d'onda dell'elettrone corrispondente all'autostato di energia E_n è data da:

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \quad (13)$$

Nel caso tridimensionale, anziché un unico numero quantico n , è necessario considerare tre numeri quantici, ciascuno associato ad una delle tre dimensioni.

2.2 I fermioni ed il principio di esclusione di Pauli

Il principio di esclusione di Pauli governa la statistica dei fermioni, ossia delle particelle i cui autovalori di *spin* possono assumere soltanto valore $1/2$ e $-1/2$ (particelle a “spin un mezzo”), come gli elettroni e i nucleoni.

Secondo tale principio:

in un sistema costituito da più fermioni (ad esempio elettroni) due particelle non possono trovarsi nello stesso stato quantico, cioè non possono assumere lo stesso set di numeri quantici.

Per esempio, considerando gli elettroni atomici, il principio di esclusione di Pauli prescrive che lo stato fondamentale può essere occupato soltanto da due elettroni, uno con “spin up”, l’altro con “spin down”. Analogamente, considerando un sistema di elettroni in una scatola, un dato autovalore E_n dell’energia può essere associato soltanto a due elettroni (con spin opposto).

E’ evidente che il principio di esclusione di Pauli influenza in modo critico la distribuzione dell’energia di un sistema di elettroni.

2.3 Energia di fermi

Consideriamo un sistema di N elettroni (di cui trascuriamo l’interazione colombiana) in una scatola unidimensionale di lunghezza L . Alla temperatura di 0 K gli elettroni occuperanno il più basso stato di energia compatibile con il principio di esclusione. In queste condizioni la distribuzione dell’energia del sistema si può ottenere ponendo due elettroni nel stato di energia più basso E_1 , altri due nello stato caratterizzato dall’energia E_2 e così via. Gli N elettroni, dunque, riempiranno i primi $N/2$ livelli d’energia. Così il più elevato livello d’energia occupato (da uno o due elettroni a seconda che N sia dispari o pari) sarà quello corrispondente all’energia:

$$E_F = E_{N/2} = \left(\frac{N}{L}\right)^2 \frac{h^2}{32m_e} \quad (14)$$

Tale valore dell’energia è chiamato **energia di Fermi** E_F .

Nel caso tridimensionale si dimostra che l’energia di Fermi è:

$$E_F = \left(\frac{N}{L}\right)^{2/3} \frac{h^2}{8m_e} \quad (15)$$

L’energia di Fermi dipende dunque dal numero di elettroni per unità di volume.

Inoltre, utilizzando la distribuzione completa dell’energia degli elettroni (distribuzione di Fermi - Dirac), si trova che l’energia media degli elettroni a $T = 0$ è:

$$E_m = \frac{3}{5} E_F \quad (16)$$

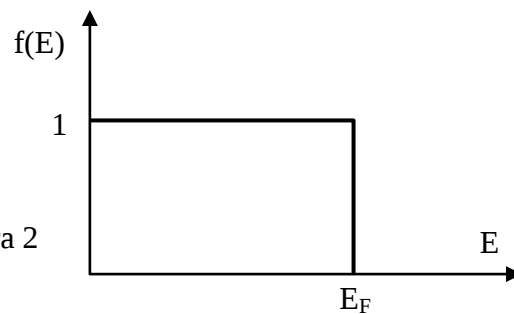
E' importante sottolineare che tale energia è molto più grande di quella prevista dalla statistica classica di Maxwell-Boltzmann. Classicamente, infatti, l'energia media degli elettroni è dell'ordine di kT , pertanto a $T = 0$ K essa è nulla. Secondo la statistica di Fermi-Dirac, invece, E_m è diversa da zero anche per $T=0$ K. Per il rame, ad esempio, a $T = 0$ K essa è pari a circa 4 eV, e dunque di parecchi ordini di grandezza più grande dell'energia termica, pari a circa 0.03 eV, ricavata dalla statistica di M-B a temperature ordinarie (300 K).

2.4 Fattore di Fermi, temperatura di Fermi e velocità di Fermi

Il fattore di fermi rappresenta la probabilità che un autostato dell'energia sia occupato. A $T = 0$ K tutti gli stati corrispondenti a energie inferiori ad E_F sono occupati, mentre quelli con energia più alta sono vuoti. Pertanto il fattore di fermi a 0 K è (figura 2):

$$\begin{aligned} f(E) &= 1 && \text{per } E < E_F \\ f(E) &= 0 && \text{per } E > E_F \end{aligned}$$

Figura 2



a temperature più elevate, alcuni elettroni, come conseguenza delle interazioni con il reticolo, acquistano energia sufficiente per occupare livelli di energia superiori ad E_F . Tuttavia, bisogna tenere presente che un elettrone può muoversi verso uno stato di energia diversa soltanto se quest'ultimo è libero. D'altra parte, poiché l'energia del reticolo cristallino è dell'ordine di kT , l'energia che può acquistare un elettrone grazie alle interazioni con il reticolo non può essere più grande di kT .

Possiamo così concludere che soltanto gli elettroni le cui energie si trovano entro un kT dal livello di fermi possono guadagnare energia al crescere della temperatura. Così, per esempio, a 300 K poiché l'energia kT (pari a circa 0.03 eV) del rame risulta molto più piccola dell'energia di fermi (pari a 7.04 eV), soltanto una piccola frazione di elettroni prossimi al livello di fermi potranno muoversi verso stati di energia un po' più elevati dell'energia di fermi.

La figura riporta il grafico del fattore di Fermi in funzione dell'energia per $T > 0$ K.

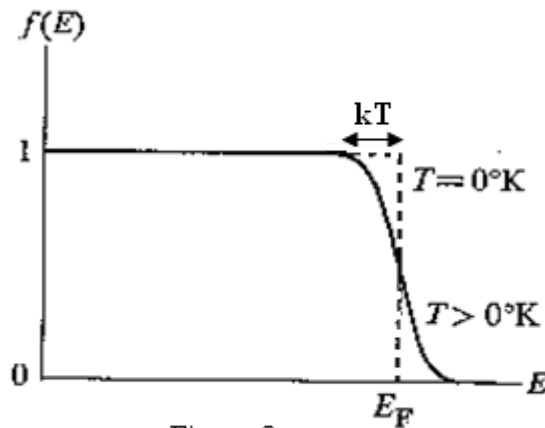


Figura 3

Poiché per $T > 0 \text{ K}$ non vi è una netta distinzione tra livelli occupati e livelli non occupati, è necessario modificare la definizione di “energia di Fermi”:

l'energia di Fermi a temperatura T è l'energia per la quale la probabilità di occupazione (ossia il fattore di Fermi) è pari a $\frac{1}{2}$.

Si definisce inoltre la **temperatura di Fermi** come:

$$k T_F = E_F \quad (17)$$

Per temperature molto più piccole di T_F l'energia media degli ioni del reticolo (che è dell'ordine di kT) è molto più piccola di E_F , e pertanto la distribuzione di energia degli elettroni differisce poco da quella corrispondente a $T = 0 \text{ K}$.

In genere per i metalli la temperatura di Fermi è molto elevata, cosicché anche a temperature ordinarie la distribuzione d'energia degli elettroni è ben approssimata dal fattore di Fermi corrispondente a $T = 0 \text{ K}$.

In figura 4 è riportato il grafico del fattore di Fermi in funzione della velocità degli elettroni nel caso unidimensionale. Considerando il grafico, possiamo definire la **velocità di Fermi** a $T \neq 0 \text{ K}$ come:

il valore u_F della velocità che corrisponde a $F(E) = \frac{1}{2}$.

In altri termini:

$$u_F = \sqrt{\frac{2E_F}{m_e}} \quad (18)$$

Quando al conduttore viene applicato un campo elettrico tutti gli elettroni liberi partecipano alla conduzione. Essi infatti vengono accelerati dal campo e le loro velocità subiscono un incremento secondo il verso della forza elettrica applicata.

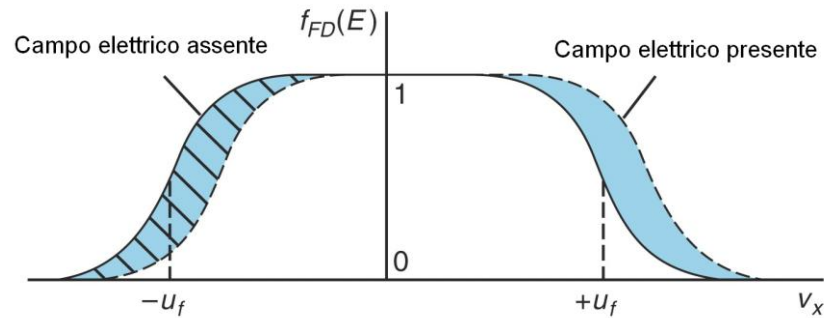


Figura 4

La figura 4 mostra come viene modificato il fattore di Fermi quando gli elettroni sono sottoposti ad un campo elettrico esterno. Sebbene le velocità di tutti gli elettroni subiscono uno shift verso valori più elevati, l'effetto complessivo del campo è equivalente ad uno shift dei soli elettroni che si trovano il prossimità del livello di Fermi.

2.5 Scattering delle onde elettroniche

Vediamo adesso come le idee introdotte consentono di superare le difficoltà insite nella teoria classica della conduzione.

Consideriamo a tal fine l'equazione (7) per la resistività, dove al posto di v_m sostituiamo u_F

$$\rho = \frac{m_e u_F}{n_e e^2 \Lambda} \quad (19)$$

Vi sono due problemi da risolvere. In primo luogo, poiché u_F è praticamente indipendente dalla temperatura, anche la resistività risulterà indipendente dalla temperatura, a meno che la dipenda dalla temperatura non provenga dal cammino libero medio.

Inoltre, abbiamo già osservato che utilizzando la velocità media degli elettroni ricavata dalla statistica di Maxwell-Boltzmann, il valore di resistività previsto dal modello classico a 300 K risulta sei volte più grande del valore misurato. Poiché la velocità di Fermi risulta circa 16 volte più grande di v_m a 300 K, il valore della resistività calcolato con la formula precedente sarebbe circa 100 volte più grande di quello misurato.

Entrambi questi problemi possono essere risolti interpretando quantisticamente il cammino libero medio degli elettroni liberi.

Abbiamo visto che nell'equazione classica $\Lambda = 1/nA$, $A = \pi r^2$ rappresenta l'area di una ion vista dall'elettrone. Se però si effettua il calcolo quantistico, ci si rende conto che un'onda elettronica che attraversa un reticolo cristallino perfettamente ordinato non subisce alcuno scattering, con la conseguenza che il cammino libero dell'elettrone risulta infinito. Lo scattering si verifica soltanto se si considerano le *imperfezioni* del reticolo, cioè le deviazioni degli ioni reticolari da una configurazione perfettamente ordinata. Le cause più comuni di tali deviazioni consistono nelle vibrazioni termiche degli ioni e nelle *impurezze*.

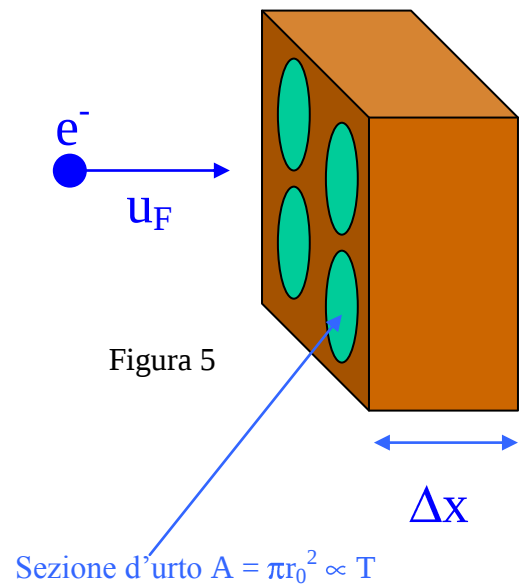
Tenendo opportunamente conto di tali fattori, possiamo continuare ad utilizzare l'espressione $\Lambda = 1/nA$, a condizione di interpretare in modo diverso l'area A .

In termini quantistici, gli ioni del reticolo vanno, infatti, considerati come punti, con dimensioni nulle ma con una sezione d'urto $A = \pi r_0^2$, dove il raggio r_0 è proporzionale all'ampiezza delle vibrazioni termiche dello ione

D'altra parte sappiamo che l'energia di un oscillatore armonico è proporzionale al quadrato dell'ampiezza d'oscillazione e, dunque, ad r_0^2 . Dunque la sezione d'urto A risulta proporzionale all'energia E dell'oscillatore armonico.

Inoltre, dal principio di equipartizione dell'energia discende che l'energia media d'oscillazione degli ioni (che a temperature ordinarie obbediscono alla statistica di Maxwell-Boltzmann) è proporzionale a kT . Quindi poiché A risulta proporzionale a T , Λ risulta proporzionale a $1/T$ e la resistività calcolata con la formula (19) risulta proporzionale a T , in perfetto accordo con l'andamento osservato sperimentalmente.

L'area efficace A può essere calcolata e risultati forniscono valori di resistività in accordo con quelli ricavati sperimentalmente.



La presenza di impurezze nei metalli causa delle deviazioni rispetto alla condizione di perfetta regolarità del reticolo cristallino. Gli effetti conseguenti sulla resistività sono quasi indipendenti dalla temperatura.

In generale, la resistività di un metallo può essere scritta come la somma di due termini:

$$\rho = \rho_T + \rho_i \quad (20)$$

Dove ρ_T è il contributo dovuto alle vibrazioni termiche del reticolo e ρ_i allo scattering degli elettroni da parte delle impurezze.

Quando la temperatura tende a valori molto piccoli il termine ρ_T tende a zero e la resistività tende ad assumere il valore costante ρ_i dovuto alle impurezze (figura 6).

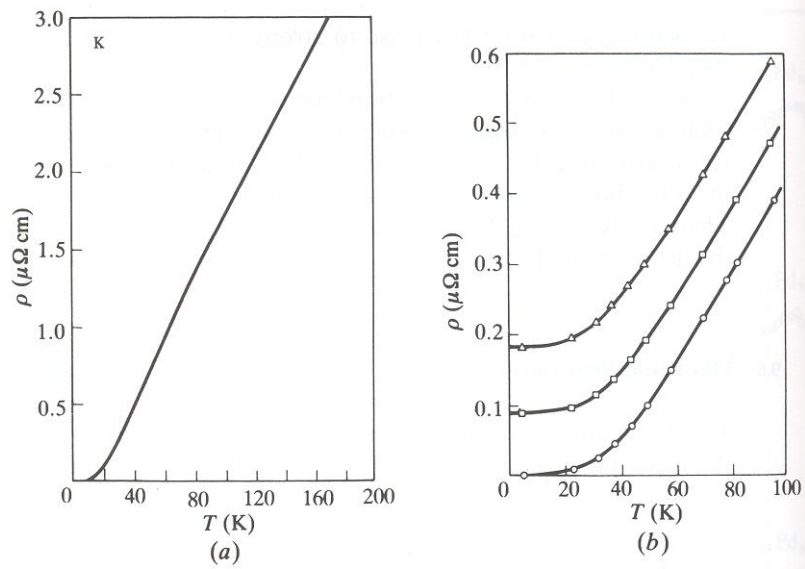


Figura 6.

(a) Andamento della resistività del potassio puro come funzione della temperatura;

(b) Effetto di un piccolo ammontare di impurezze sulla resistenza residua dell'argento

(After Dugdale 1977)