

**Ampliación de Física del Estado Sólido**  
Relación 3: Fenómenos de transporte

**Juan J. Meléndez**

### Problema 3.1

Demostrar que la distribución de tiempos de vuelo para un electrón en un sólido, en el modelo de Sommerfeld, está dada por

$$P(t) = \frac{1}{\tau} e^{-t/\tau}$$

**Nota:** Para ello, considerar que la probabilidad de que  $t$  sea un tiempo de vuelo para el electrón es igual a la probabilidad de que el electrón no colisione en el intervalo  $0 - t$  y colisione en el instante  $\Delta t$  inmediatamente posterior.

Consideremos un intervalo de tiempo  $t$  finito, contado a partir de un origen arbitrario. Para que este intervalo  $t$  corresponda a un *tiempo de vuelo* del electrón (es decir, a un intervalo de tiempo sin colisión), debe ocurrir que el electrón no colisione entre  $0$  y  $t$ , y colisione justo en el instante  $\Delta t$  inmediatamente posterior. Así pues, la probabilidad de que  $t$  sea un tiempo de vuelo del electrón está dada por

$$p(t)\Delta t = w(t)\frac{\Delta t}{\tau}, \quad (1)$$

donde  $w(t)$  es la probabilidad de que el electrón no colisione en el intervalo  $0 - t$ , que llamaremos *probabilidad de supervivencia*.

Por hipótesis del modelo de Drude, el electrón tiene una probabilidad de colisión por unidad de tiempo dada por  $1/\tau$ .

La probabilidad de supervivencia se puede calcular dividiendo el intervalo de tiempo  $t$  intervalos cortos de longitud  $\Delta t$ , que supondremos infinitesimal; en el intervalo  $0 - t$  existen en  $\frac{t}{\Delta t}$  de estos intervalos. La probabilidad de que el electrón no colisione en cada uno de esos intervalos es  $1 - \frac{\Delta t}{\tau}$ , de forma que la probabilidad de que no colisione en el intervalo finito es

$$w(t) = \prod_{i=1}^{t/\Delta t} \left(1 - \frac{\Delta t}{\tau}\right) = \left(1 - \frac{\Delta t}{\tau}\right)^{t/\Delta t},$$

esto es,

$$w(t) = \left(1 - \frac{\Delta t}{\tau}\right)^{\frac{\tau}{\Delta t} \frac{t}{\tau}} = \left\{ \left(1 - \frac{\Delta t}{\tau}\right)^{\tau/\Delta t} \right\}^{\frac{t}{\tau}}$$

y, teniendo en cuenta que

$$\lim_{x \rightarrow 0} (1 - x)^{1/x} = e^{-1},$$

resulta, para  $\Delta t \rightarrow 0$ :

$$w(t) = e^{-t/\tau}$$

La distribución de tiempos de vuelo (1) es, en definitiva,

$$p(t) = \frac{1}{\tau} e^{-t/\tau}, \quad (2)$$

como queríamos demostrar.

Es fácil verificar que  $p(t)$  está normalizada:

$$\int_0^{\infty} p(t) dt = 1$$

También es fácil verificar que  $\tau$  es el *tiempo medio entre colisiones*. En efecto, este tiempo se define como

$$\langle t \rangle = \int_0^{\infty} t p(t) dt,$$

donde  $p(t)$  está dada por (2). Entonces

$$\langle t \rangle = \frac{1}{\tau} \int_0^{\infty} t e^{-t/\tau} dt = \tau,$$

como se demuestra integrando por partes.

### Problema 3.2

Utilizando la ecuación de Boltzmann estacionaria en la aproximación del tiempo de relajación, demostrar que la movilidad de partículas cargadas en un gas clásico sometido a campo eléctrico está dada por

$$\mu = \frac{e}{m^*} \frac{\langle v^2 \tau(\vec{k}) \rangle}{\langle v^2 \rangle}$$

La clave del problema es que se trata de un *gas clásico*.

Como hemos visto en clase, la conductividad eléctrica de un sistema de partículas cargadas (que supondremos electrones, por fijar ideas), en la aproximación del tiempo de relajación, está dada por

$$\sigma = \frac{e^2}{4\pi^3} \int_{ZB} v_x^2(\vec{k}) \tau(\vec{k}) \frac{\partial n_0(\vec{k})}{\partial \varepsilon} d\vec{k}, \quad (3)$$

donde estamos suponiendo que el sólido es isótropo y que el campo (y, por tanto, la densidad de corriente) son paralelos al eje  $OX$ . Introduciendo ahora el cambio de variable

$$d\vec{k} = \frac{dS_\varepsilon d\varepsilon}{|\nabla_{\vec{k}} \varepsilon(\vec{k})|}$$

y teniendo en cuenta la definición de la densidad de estados,

$$g(\varepsilon) = \frac{1}{4\pi^3} \int_{S_\varepsilon} \frac{dS_\varepsilon}{|\nabla_{\vec{k}} \varepsilon(\vec{k})|},$$

la ecuación (3) se reescribe como

$$\sigma = e^2 \int_{\varepsilon} v_x^2(\varepsilon) \tau(\varepsilon) \frac{\partial n_0(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} g(\varepsilon) d\varepsilon = \frac{e^2}{3} \int_{\varepsilon} v^2(\varepsilon) \tau(\varepsilon) \frac{\partial n_0(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} g(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (4)$$

El enunciado indica que se trata de un gas clásico; en tal caso,  $n_0(\varepsilon)$  está dada por la *distribución de Boltzmann*:

$$n_0(\varepsilon) = \frac{e^{-\varepsilon/k_B T}}{Z}, \quad (5)$$

donde

$$Z = \int_{\varepsilon} e^{-\varepsilon/k_B T} d\varepsilon$$

Entonces

$$\frac{\partial n_0(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} = -\frac{1}{k_B T} \frac{e^{-\varepsilon/k_B T}}{Z} = -\frac{1}{k_B T} n_0$$

y, sustituyendo en (4), resulta

$$\sigma = -\frac{e^2}{3k_B T} \int_{\varepsilon} v^2(\varepsilon) \tau(\varepsilon) g(\varepsilon) n_0(\varepsilon) d\varepsilon \quad (6)$$

Ahora bien: en un sistema descrito por una cierta distribución  $n(\varepsilon)$ , el valor medio de una magnitud  $\alpha(\varepsilon)$  es

$$\langle \alpha \rangle = \int_{\varepsilon} \alpha(\varepsilon) g(\varepsilon) n(\varepsilon) d\varepsilon,$$

de modo que la integral que aparece en (6) es

$$\int_{\varepsilon} v^2(\varepsilon) \tau(\varepsilon) g(\varepsilon) n_0(\varepsilon) d\varepsilon \equiv \langle v^2 \tau \rangle \quad (7)$$

Por otra parte, en un sistema clásico se verifica el *teorema de equipartición*, que indica que el valor promedio de la energía cinética es proporcional a la temperatura absoluta:

$$\langle K \rangle = \frac{1}{2} m^* \langle v^2 \rangle = \frac{3}{2} n_e k_B T,$$

donde  $n_e$  es la concentración de partículas; en nuestro caso, de electrones. Entonces

$$3k_B T = \frac{m^* \langle v^2 \rangle}{n_e} \quad (8)$$

Sustituyendo (7) y (8) en (6) resulta

$$\sigma = -n_e e^2 \frac{m^* \langle v^2 \tau \rangle}{\langle v^2 \rangle}$$

Teniendo en cuenta finalmente que

$$\sigma = -n_e e \mu,$$

donde  $\mu$  es la *movilidad* de las partículas, resulta

$$\mu = -\frac{\sigma}{n_e e} = \frac{e}{m^*} \frac{\langle v^2 \tau \rangle}{\langle v^2 \rangle},$$

como queríamos demostrar.

### Problema 3.3

Considerar un semiconductor sometido a un campo eléctrico y a un gradiente de temperaturas, ambos paralelos al eje  $OX$ . Ignorando las posibles anisotropías del sistema, demostrar que el semiconductor se comporta a efectos eléctricos como si estuviese sometido a un campo eléctrico efectivo:

$$E'_x = E_x + \frac{1}{e} \frac{\partial \varepsilon_F}{\partial x},$$

donde  $\varepsilon_F$  denota el nivel de Fermi del semiconductor.

La densidad de corriente en el semiconductor, si suponemos que éste es isótropo, está dada por

$$j_x = -\frac{e}{4\pi^3} \int_{ZB} v_x(\vec{k}) n(\vec{r}, \vec{k}, T) d\vec{k}, \quad (9)$$

donde, en la aproximación del tiempo de relajación,

$$n(\vec{k}, \vec{r}, T) = n_0(\vec{k}, T) - \tau(\vec{k}) \left[ \vec{v} \cdot \frac{\partial n_0}{\partial \vec{r}} - \frac{e}{\hbar} \vec{E} \cdot \frac{\partial n_0}{\partial \vec{k}} \right],$$

esto es,

$$n(\vec{k}, \vec{r}, T) = n_0(\vec{k}, T) - \tau(\vec{k}) \left[ v_x \frac{\partial n_0}{\partial x} - \frac{e}{\hbar} \frac{\partial n_0}{\partial k_x} E_x \right], \quad (10)$$

En (10) aparece la derivada de la distribución de Fermi-Dirac con respecto a la posición. Esta distribución está dada, como sabemos, por

$$n_0(\varepsilon, T) = \frac{1}{e^{(\varepsilon - \mu)/k_B T} + 1},$$

y varía con la posición a través de dos variables: de la temperatura, que no es constante porque existe un gradiente de temperatura, y del potencial químico  $\mu$  (que, en el contexto de la Física del Estado Sólido, se llama *nivel de Fermi*). Entonces

$$\frac{\partial n_0}{\partial x} = \frac{\partial n_0}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial x} + \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon_F} \frac{\partial \varepsilon_F}{\partial x} = \frac{\partial n_0}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial x} - \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} \frac{\partial \varepsilon_F}{\partial x} \quad (11)$$

donde hemos tenido en cuenta que, debido a la forma de la distribución de Fermi-Dirac,

$$\frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon_F} = - \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon}$$

Por otra parte,

$$\frac{\partial n_0}{\partial k_x} = \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial k_x} = \hbar v_x \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} \quad (12)$$

Sustituyendo (11) y (12) en (10), resulta entonces

$$n(\vec{k}, \vec{r}, T) = n_0(\vec{k}, T) + \tau(\vec{k}) v_x \frac{\partial n_0}{\partial T} \left( - \frac{\partial T}{\partial x} \right) + e \tau(\vec{k}) v_x \left[ E_x + \frac{1}{e} \frac{\partial \varepsilon_F}{\partial x} \right] \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} \quad (13)$$

En (13), el primer sumando da una contribución nula a la densidad de corriente (9). Si repetís el cálculo que hicimos en clase, veréis que el segundo sumando da un término proporcional al gradiente de temperatura y describe el efecto Seebeck, como habréis visto en la teoría. En cuanto al tercer sumando, para ver su efecto basta con recordar que, cuando estudiamos la conductividad eléctrica, escribimos la distribución de no equilibrio como

$$n(\vec{k}, T) = n_0(\vec{k}) + e v_x \tau(\vec{k}) \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} E_x, \quad (14)$$

donde  $E_x$  es el campo eléctrico aplicado y  $n_0(\vec{k})$  daba una contribución nula. La distribución (14) lleva a

$$j_x = \sigma E_x,$$

donde  $\sigma$  es la conductividad eléctrica. En este problema, el tercer sumando es

$$e v_x \tau(\vec{k}) \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} \left[ E_x + \frac{1}{e} \frac{\partial \varepsilon_F}{\partial x} \right]$$

y, definiendo un campo eléctrico efectivo como

$$E'_x = E_x + \frac{1}{e} \frac{\partial \varepsilon_F}{\partial x}, \quad (15)$$

tiene la misma forma funcional que (14) y, por tanto, da lugar al mismo resultado. Así pues, el semiconductor del enunciado se comporta como si estuviera sometido al campo efectivo (15), como queríamos demostrar.

### Problema 3.4

Bajo una cierta aproximación, la interacción entre electrones e impurezas ionizadas de carga  $Ze$  en un sólido se describe mediante el denominado potencial de Thomas-Fermi:

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\kappa_0} \frac{e^{-r/\lambda_{TF}}}{r},$$

donde  $\lambda_{TF}$  es una cierta constante con dimensiones de longitud y  $\kappa_0$  la constante dieléctrica del sólido. Demostrar que la probabilidad de transición de un estado  $\vec{k}$  a otro estado  $\vec{k}'$  (supuesta elástica) es:

$$W_{\vec{k},\vec{k}'} = \frac{2\pi}{\hbar} \delta[\varepsilon(\vec{k}) - \varepsilon(\vec{k}')] \left| \frac{Ze^2}{4V\kappa_0 k^2} \frac{1}{\sin^2 \frac{\theta}{2} + (2k\lambda_{TF})^{-2}} \right|^2,$$

donde  $\theta$  es el ángulo de dispersión.

La probabilidad de que se produzca una transición entre dos estados electrónicos  $\vec{k}$  y  $\vec{k}'$  debido a un cierto potencial dispersor esférico  $V_{disp}(r)$  está dada por la *regla de oro de Fermi*, como sabemos:

$$W_{\vec{k}\vec{k}'} = \frac{2\pi}{\hbar} \rho^f |H_{\vec{k}\vec{k}'}|^2, \quad (16)$$

donde

$$H_{\vec{k}\vec{k}'} = \langle \psi_{\vec{k}'} | V_{disp}(r) | \psi_{\vec{k}} \rangle,$$

$|\psi_{\vec{k}}\rangle$  y  $|\psi_{\vec{k}'}\rangle$  denotan, respectivamente, los estados inicial y final, y  $\rho^f$  es la densidad de estados finales. Si el proceso es elástico, entonces el estado final debe tener la misma energía que el inicial, de modo que

$$\rho^f = \delta(\varepsilon_i - \varepsilon_f) \equiv \delta(\varepsilon - \varepsilon')$$

Supongamos que los estados inicial y final están dados por ondas planas:

$$\psi_{\vec{k}} = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

En general, el estado de un electrón no es una onda plana, pero se puede escribir como una *combinación lineal* de ellas. En consecuencia, la probabilidad de transición en un caso general se escribe como combinación lineal de la que vamos a calcular aquí.

Entonces

$$H_{\vec{k}\vec{k}'} = \frac{1}{V} \iiint V_{disp}(r) e^{-i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}} d\vec{r} = -\frac{1}{V} \frac{Ze^2}{4\pi\kappa_0} \iiint e^{-i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}} \frac{e^{-r/\lambda_{TF}}}{r} d\vec{r} \quad (17)$$

La integral que aparece en (17) se puede resolver en coordenadas esféricas:

$$\iiint e^{-i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}} \frac{e^{-r/\lambda_{TF}}}{r} d\vec{r} = 2\pi \int_0^\infty \int_0^\pi \frac{e^{-r/\lambda_{TF}}}{r} e^{-i|\vec{k}-\vec{k}'|r \cos \theta} r^2 \sin \theta d\theta dr,$$

donde

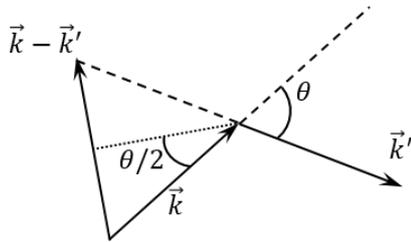
$$\begin{aligned} \int_0^\pi e^{-i|\vec{k}-\vec{k}'|r \cos \theta} \sin \theta d\theta &= \left\| \begin{aligned} u &= -i|\vec{k}-\vec{k}'|r \cos \theta \\ du &= i|\vec{k}-\vec{k}'|r \sin \theta d\theta \end{aligned} \right\| = \frac{1}{i|\vec{k}-\vec{k}'|r} \int_{-i|\vec{k}-\vec{k}'|r}^{+i|\vec{k}-\vec{k}'|r} e^u du = \\ &= 2 \frac{\sin |\vec{k}' - \vec{k}|r}{|\vec{k} - \vec{k}'|r} \end{aligned} \quad (18)$$

Por otra parte, teniendo en cuenta que

$$\int e^{ax} \sin bx dx = e^{ax} \frac{a \sin bx - b \cos bx}{a^2 + b^2},$$

la integral radial es

$$\begin{aligned} & 2 \int_0^\infty r e^{-r/\lambda_{TF}} \frac{\sin |\vec{k} - \vec{k}'| r}{|\vec{k} - \vec{k}'| r} dr = \\ & = -\frac{2}{|\vec{k} - \vec{k}'|} \left[ e^{-r/\lambda_{TF}} \frac{1}{\lambda_{TF}} \frac{\sin |\vec{k}' - \vec{k}| r + |\vec{k}' - \vec{k}| \cos |\vec{k}' - \vec{k}| r}{|\vec{k} - \vec{k}'|^2 + \lambda_{TF}^{-2}} \right]_0^\infty = \\ & = \frac{2}{|\vec{k}' - \vec{k}|} \frac{|\vec{k}' - \vec{k}|}{|\vec{k} - \vec{k}'|^2 + \lambda_{TF}^{-2}} = \frac{2}{|\vec{k} - \vec{k}'|^2 + \lambda_{TF}^{-2}} \end{aligned} \quad (19)$$



Consideremos ahora la situación de la figura de la izquierda, donde aparecen los vectores de onda inicial y final,  $\vec{k}$  y  $\vec{k}'$ ; puesto que el proceso es elástico, los dos vectores tienen igual módulo. Según este dibujo,

$$|\vec{k} - \vec{k}'| = 2k \sin \frac{\theta}{2},$$

donde  $\theta$  es el ángulo que forman los vectores de onda inicial y final. Sustituyendo entonces en (19), resulta

$$2 \int_0^\infty r e^{-r/\lambda_{TF}} \frac{\sin |\vec{k} - \vec{k}'| r}{|\vec{k} - \vec{k}'| r} dr = \frac{2}{4k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2} + \lambda_{TF}^{-2}} \quad (20)$$

En definitiva, sustituyendo (20) en (17), resulta

$$H_{\vec{k}\vec{k}'} = -\frac{2\pi}{V} \frac{Ze^2}{4\pi\kappa_0} \frac{1}{4k^2} \frac{1}{\sin^2 \frac{\theta}{2} + (2k\lambda_{TF})^{-2}} = -\frac{Ze^2}{4k^2 V \kappa_0} \frac{1}{\sin^2 \frac{\theta}{2} + (2k\lambda_{TF})^{-2}}$$

y, sustituyendo en (16),

$$W_{\vec{k}\vec{k}'} = \frac{2\pi}{\hbar} \delta[\varepsilon(\vec{k}) - \varepsilon(\vec{k}')] \left| \frac{Ze^2}{4k^2 V \kappa_0} \frac{1}{\sin^2 \frac{\theta}{2} + (2k\lambda_{TF})^{-2}} \right|^2, \quad (21)$$

como queríamos demostrar.

### Problema 3.5

Utilizando el resultado anterior, demostrar que el tiempo de relajación para la dispersión de electrones cuasi-libres por impurezas ionizadas es, en primera aproximación:

$$\tau(\varepsilon) \propto \frac{\varepsilon^{3/2}}{n_i},$$

donde  $n_i$  es el número de impurezas por unidad de volumen.

El tiempo de relajación para un mecanismo de dispersión dado está relacionado con la probabilidad  $W_{\vec{k}\vec{k}'}$  que hemos calculado en el problema anterior mediante

$$\frac{1}{\tau} = \frac{N_i V}{4\pi^3} \int W_{\vec{k}\vec{k}'} (1 - \cos \theta) d\Omega_{\vec{k}'},$$

donde  $N_i$  es el número de impurezas dispersoras en el sólido y  $d\Omega_{\vec{k}'}$  es el elemento de ángulo sólido en torno al vector de onda dispersado:

$$d\Omega_{\vec{k}'} = 2\pi k'^2 \sin \theta d\theta dk'$$

En nuestro caso, teniendo en cuenta (21),

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau} = & \frac{N_i V}{4\pi^3} \frac{4\pi^2}{\hbar} \frac{Z^2 e^4}{16k^4 V^2 \kappa_0^2} \int_0^\infty \int_0^\pi \left| \frac{Ze^2}{4k^2 V \kappa_0} \frac{1}{\sin^2 \frac{\theta}{2} + (2k\lambda_{TF})^{-2}} \right|^2 \times \\ & \times k'^2 (1 - \cos \theta) \sin \theta \delta[\varepsilon(\vec{k}) - \varepsilon(\vec{k}')] dk' d\theta \end{aligned} \quad (22)$$

El resto del problema es un ejercicio numérico. Comencemos con la integral angular, que podemos resolver introduciendo el cambio de variable

$$u = \sin^2 \frac{\theta}{2} \quad du = \frac{1}{2} \sin \theta d\theta$$

y teniendo en cuenta que

$$1 - \cos \theta = 2 \sin^2 \frac{\theta}{2} = 2u$$

Entonces

$$I_1 \equiv \int_0^\pi \left( \frac{1}{\sin^2 \frac{\theta}{2} + (2k\lambda_{TF})^2} \right)^2 (1 - \cos \theta) \sin \theta d\theta = \int_0^1 \frac{4u}{(u + \alpha)^2} du, \quad (23)$$

donde

$$\alpha = (2k\lambda_{TF})^{-2}$$

La integral que aparece en (23) está tabulada:

$$\int \frac{x}{(ax + b)^2} dx = \frac{b}{a^2(ax + b)} + \frac{1}{a^2} \ln(ax + b),$$

de modo que

$$I_1 = 4 \left[ \frac{\alpha}{u + \alpha} + \ln(u + \alpha) \right]_0^1 = 4 \left[ \ln \frac{1 + \alpha}{\alpha} - \frac{1}{1 + \alpha} \right] = 4 \left[ \ln(1 + 4k^2 \lambda_{TF}^2) - \frac{4k^2 \lambda_{TF}^2}{1 + 4k^2 \lambda_{TF}^2} \right]$$

La integral radial, por su parte, se puede calcular teniendo en cuenta que, para electrones cuasi-libres,

$$\varepsilon(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}, \quad (24)$$

de manera que

$$k = \left[ \frac{2m^*}{\hbar^2} \varepsilon(k) \right]^{1/2} \implies d\varepsilon = \frac{\hbar^2}{m^*} k dk$$

Entonces

$$\begin{aligned} I_2 &\equiv \int_0^\infty k'^2 \delta[\varepsilon(\vec{k}) - \varepsilon(\vec{k}')] dk' = \frac{m^*}{\hbar^2} \int_0^\infty k' \delta(\varepsilon - \varepsilon') d\varepsilon' = \\ &= \left( \frac{2m^*}{\hbar} \right)^{1/2} \frac{m^*}{\hbar^2} \int_0^\infty \varepsilon'^{1/2} \delta(\varepsilon - \varepsilon') d\varepsilon' = \frac{1}{2} \left( \frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \varepsilon^{1/2} \end{aligned} \quad (25)$$

En definitiva, teniendo en cuenta (23), (24) y (25), resulta

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau} &= \frac{N_i}{\pi \hbar} \frac{Z^2 e^4}{16 V \kappa_0^2} \frac{1}{k^4} \frac{1}{2} \left( \frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \varepsilon^{1/2} = \\ &= \frac{Z^2 e^4}{32 \pi \hbar \kappa_0} \frac{N_i}{V} \left( \frac{\hbar^2}{2m^*} \right)^{1/2} \frac{1}{\varepsilon^{3/2}} \equiv A \frac{n_i}{\varepsilon^{3/2}} \end{aligned}$$

esto es,

$$\tau \propto \frac{\varepsilon^{3/2}}{n_i},$$

donde  $n_i$  es la densidad de impurezas dispersoras, como queríamos demostrar.