AMPLIACIÓN DE FÍSICA DEL ESTADO SÓLIDO

TEMA 3

FENÓMENOS DE TRANSPORTE

TEORÍA DE DRUDE

1. Los electrones son libres e independientes

2. Los electrones experimentan colisiones con probabilidad por unidad de tiempo $1/\tau$

$\tau \equiv$ Tiempo de colisión

3. La velocidad de emergencia de una colisión es aleatoria, y su módulo es proporcional a la temperatura local en el punto de colisión

Cantidad de movimiento promedio en $t + dt$

$\vec{f}(t)dt$ Si hay colisión entre t y $t + dt$

$\vec{p}(t) + \vec{f}(t)dt$ Si no hay colisión entre t y $t + dt$

$$\vec{p}(t + dt) = \vec{f}(t)dt \times \frac{dt}{\tau} + \left(\vec{p}(t) + \vec{f}(t)dt\right)\left(1 - \frac{dt}{\tau}\right)$$

$$\frac{d\vec{p}(t)}{dt} = \vec{f}(t) - \frac{\vec{p}(t)}{\tau}$$

Ecuación (elemental) de transporte

TEORÍA DE DRUDE

Conductividad eléctrica de los metales

$$\frac{d\vec{p}(t)}{dt} = -e\vec{E} - \frac{\vec{p}(t)}{\tau} = \vec{0} \Rightarrow \vec{p}(t) = m\vec{v}(t) = -e\vec{E}\tau \Rightarrow \vec{j}(t) = -ne\vec{v}(t) = \frac{ne^2\tau}{m}\vec{E}$$

$$\boxed{\sigma = \frac{ne^2\tau}{m}}$$

Conductividad térmica de los metales

$$\kappa = \frac{1}{3}c_V v\lambda = \frac{1}{3}c_V v^2\tau$$

$$c_V \approx \frac{\pi^2}{2}n_e k_B \frac{k_B T}{\varepsilon_F}$$

$$v^2 \approx \frac{2\varepsilon_F}{m}$$

$$\Rightarrow \boxed{\kappa = \frac{\pi^2}{3}\frac{n_e k_B}{m}k_B T\tau}$$

Ley de Wiedemann-Franz

El cociente entre las conductividades térmicas y eléctrica de un metal es proporcional a la temperatura.

$$\boxed{\frac{\chi}{\sigma T} = \frac{\pi^2}{3}\left(\frac{k_B}{e}\right)^2}$$

LA ECUACIÓN DE BOLTZMANN

Número de electrones en el elemento de volumen $d\vec{r}d\vec{k}$ del espacio fásico en t

$$dN(\vec{r},\vec{k},t) = \frac{1}{4\pi^3} n(\vec{r},\vec{k},t) d\vec{r}d\vec{k}$$

Después de la evolución (bajo ecuaciones canónicas)

$$dN(\vec{r}+d\vec{r},\vec{k}+d\vec{k},t+dt) = \frac{1}{4\pi^3} n(\vec{r}+d\vec{r},\vec{k}+d\vec{k},t+dt) d\vec{r}'d\vec{k}'$$

Si no hay colisión entre t y $t+dt$

$$dN(\vec{r}+d\vec{r},\vec{k}+d\vec{k},t+dt) = dN(\vec{r},\vec{k},t)$$

Si hay colisión entre t y $t+dt$

$$\frac{1}{4\pi^3}\left(\frac{\partial n(\vec{r},\vec{k},t)}{\partial t}\right)_{col} d\vec{r}d\vec{k}dt$$

Número de electrones del elemento $d\vec{r}d\vec{k}$ que experimentan colisiones en dt

$$n(\vec{r}+d\vec{r},\vec{k}+d\vec{k},t+dt) - n(\vec{r},\vec{k},t) = \left(\frac{\partial n(\vec{r},\vec{k},t)}{\partial t}\right)_{col} dt$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \vec{v}\cdot\frac{\partial n}{\partial \vec{r}} + \frac{d\vec{k}}{dt}\cdot\frac{\partial n}{\partial \vec{k}} = \left(\frac{\partial n}{\partial t}\right)_{col}$$

ECUACIÓN DE BOLTZMANN

LA ECUACIÓN DE BOLTZMANN

En la aproximación semiclásica

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \vec{v} \cdot \frac{\partial n}{\partial \vec{r}} - \frac{e}{\hbar}\left(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}\right) \cdot \frac{\partial n}{\partial \vec{k}} = \left(\frac{\partial n}{\partial t}\right)_{col}$$

$W(\vec{k},\vec{k}')$ Probabilidad de colisión $\vec{k} \rightarrow \vec{k}'$

$n(\vec{k},t)W(\vec{k},\vec{k}')[1 - n(\vec{k}',t)]$ Probabilidad de transición $\vec{k} \rightarrow \vec{k}'$

$n(\vec{k},' t)W(\vec{k}',\vec{k})[1 - n(\vec{k},t)]$ Probabilidad de transición $\vec{k}' \rightarrow \vec{k}$

$$\left(\frac{\partial n(\vec{k},t)}{\partial t}\right)_{col} = \frac{V}{4\pi^3}\int_{ZB}\{n(\vec{k}',t)W(\vec{k}',\vec{k})[1 - n(\vec{k},t)] - n(\vec{k},t)W(\vec{k},\vec{k}')[1 - n(\vec{k}',t)]\}d\vec{k}'$$

Expresión general del término de colisión

APROXIMACIÓN DEL TIEMPO DE RELAJACIÓN

$$\left(\frac{\partial n(\vec{k},t)}{\partial t}\right)_{col} = -\frac{n(\vec{k},t) - n_0(\vec{k})}{\tau(\vec{k})}$$

$\tau(\vec{k}) \equiv$ Tiempo de relajación

Significado físico

En condiciones estacionarias se "apagan" los campos

$$\frac{\partial n(\vec{k},t)}{\partial t} = -\frac{n(\vec{k},t) - n_0(\vec{k})}{\tau(\vec{k})}$$

$$n(\vec{k},t=0) = n_{estac}(\vec{k})$$

$$\boxed{n(\vec{k},t) - n_0(\vec{k}) = [n_{estac}(\vec{k}) - n_0(\vec{k})]e^{-t/\tau(\vec{k})}}$$

Sistema homogéneo en condiciones estacionarias

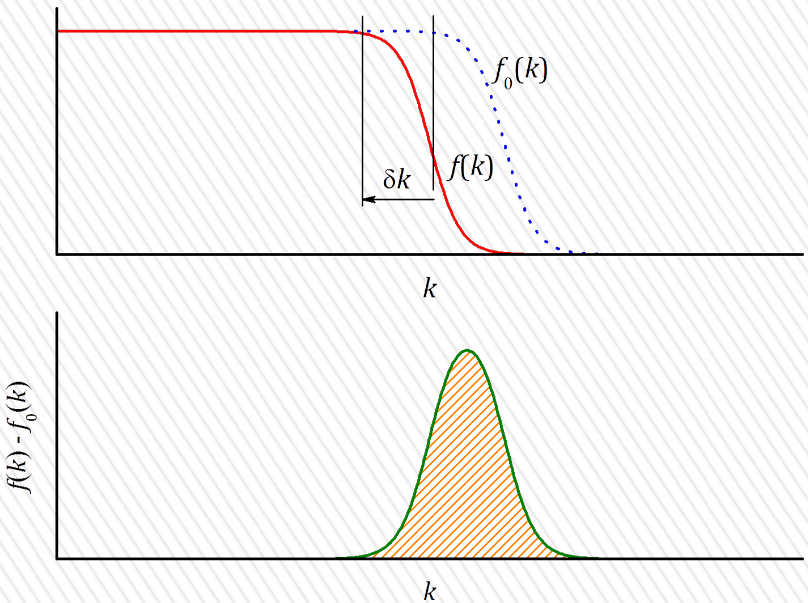
$$-\frac{e}{\hbar}(\vec{E} + \vec{v}\times\vec{B})\cdot\frac{\partial n}{\partial \vec{k}} = -\frac{n(\vec{k},t) - n_0(\vec{k})}{\tau(\vec{k})} \Rightarrow n(\vec{k}) = n_0(\vec{k}) + \frac{e}{\hbar}\tau(\vec{k})(\vec{E} + \vec{v}\times\vec{B})\frac{\partial n(\vec{k})}{\partial \vec{k}}$$

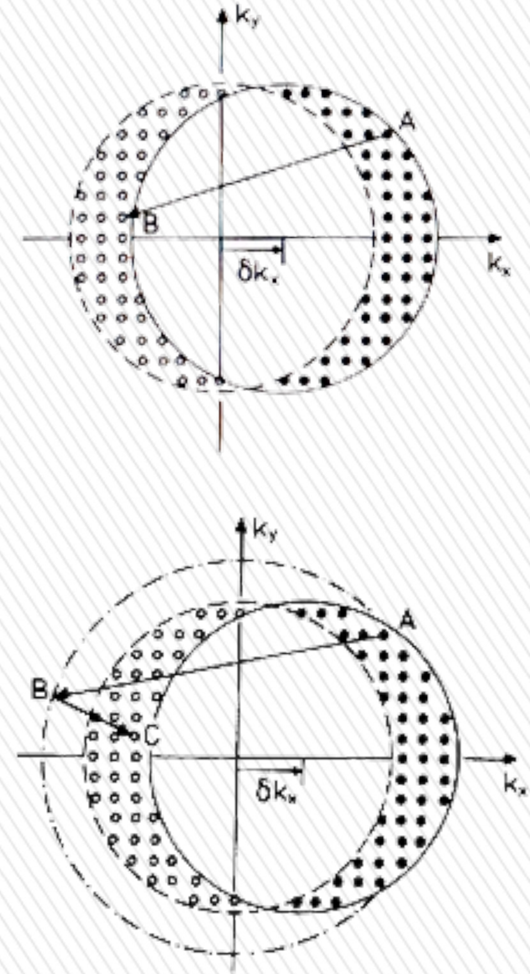
$$n(\vec{k}) \approx n_0(\vec{k}) + \frac{e}{\hbar}\tau(\vec{k})(\vec{E} + \vec{v}\times\vec{B})\frac{\partial n_0(\vec{k})}{\partial \vec{k}}$$

Ecuación de Boltzmann linealizada

APROXIMACIÓN DEL TIEMPO DE RELAJACIÓN

$$\boxed{n(\vec{k}) \approx n_0\left[\vec{k} + \frac{e}{\hbar}\tau(\vec{k})\left(\vec{E} + \vec{v}\times\vec{B}\right)\right]}$$





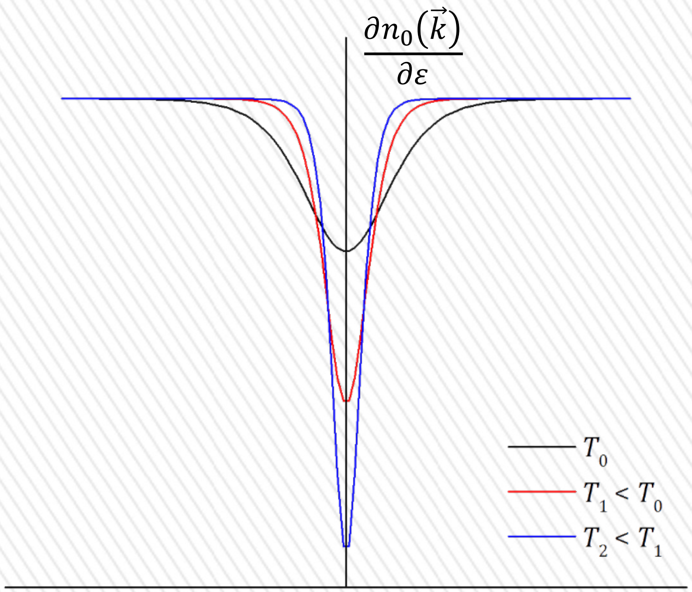
$$\delta\vec{k} = \frac{e\tau(\vec{k})}{\hbar}\left(\vec{E} + \vec{v}\times\vec{B}\right)$$

CONDUCTIVIDAD ELÉCTRICA DE LOS METALES

$$\vec{j} = -\frac{e}{4\pi^3}\int_{ZB}\vec{v}(\vec{k})n(\vec{k})d\vec{k} \quad \Rightarrow \quad \vec{j} = -\frac{e}{4\pi^3}\int_{ZB}\vec{v}(\vec{k})\left[n_0(\vec{k}) + \frac{e\tau(\vec{k})}{\hbar}E_x\frac{\partial n_0(\vec{k})}{\partial k_x}\right]d\vec{k}$$

$$j_y = j_z = 0 \qquad \int_{ZB}\vec{v}(\vec{k})n_0(\vec{k})d\vec{k} = \vec{0} \qquad \frac{\partial n_0(\vec{k})}{\partial k_x} = \hbar v_x\frac{\partial n_0(\vec{k})}{\partial \varepsilon}$$

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



$$\frac{\partial n_0(\vec{k})}{\partial \varepsilon} \approx -\delta(\varepsilon - \varepsilon_F) \qquad d\vec{k} = dS_\varepsilon\frac{d\varepsilon}{\hbar v(\vec{k})}$$

$$\sigma \approx \frac{e^2}{4\pi^3\hbar}\int_{S_F}\frac{v_x^2(\vec{k})}{v(\vec{k})}\tau(\vec{k})dS_\varepsilon$$

CONDUCTIVIDAD ELÉCTRICA DE LOS METALES

Sólo los electrones situados en la superficie de Fermi contribuyen a la conductividad eléctrica

Electrones cuasi-libres

$$v(\varepsilon_F) = \frac{\hbar k_F}{m^*} \qquad v_x^2(\varepsilon_F) = \frac{1}{3} v^2(\varepsilon_F)$$

$$\sigma \approx \frac{e^2}{3\pi^2} \frac{k_F^3 \tau(\varepsilon_F)}{m^*} = \frac{n_e e^2}{m^*} \tau(\varepsilon_F)$$

$$\boxed{\sigma = n_e e \mu}$$

$\mu \equiv$ Movilidad de los electrones

Expresión general

$$\sigma_{ij} = \frac{e^2}{4\pi^3 \hbar} \int_{S_F} \tau(\vec{k}) \frac{v_i(\vec{k}) v_j(\vec{k})}{v(\vec{k})} dS_\varepsilon$$

CONDUCTIVIDAD TÉRMICA DE LOS METALES

$$\vec{j}_U = \frac{1}{4\pi^3}\int_{ZB} \varepsilon(\vec{k})\vec{v}(\vec{k})n(\vec{k},\vec{r})d\vec{k}$$

$$\vec{j}_Q = \vec{j}_U - \mu\vec{j}_N$$

$$\vec{j}_N = \frac{1}{4\pi^3}\int_{ZB} \vec{v}(\vec{k})n(\vec{k},\vec{r})d\vec{k}$$

$$\boxed{\vec{j}_Q = \frac{1}{4\pi^3}\int_{ZB} [\varepsilon(\vec{k}) - \mu]\vec{v}(\vec{k})n(\vec{k},\vec{r})d\vec{k}}$$

$$n(\vec{k},\vec{r}) \approx n_0(\vec{k}) - \tau(\vec{k})\vec{v}(\vec{k}) \cdot \frac{\partial n_0(\vec{k})}{\partial \vec{r}} = n_0(\vec{k}) - \tau(\vec{k})\vec{v}(\vec{k}) \cdot \frac{\partial n_0}{\partial T}\frac{\partial T}{\partial \vec{r}}$$

Si el gradiente es paralelo al eje OX

$$j_{Q,x} \approx \frac{1}{4\pi^3}\int_{ZB} [\varepsilon(\vec{k}) - \mu]v_x^2(\vec{k})\tau(\vec{k})\frac{\partial n_0(\vec{k})}{\partial T}\left(-\frac{\partial T}{\partial x}\right)d\vec{k}$$

$$\boxed{\chi = \frac{1}{4\pi^3}\int_{ZB} [\varepsilon(\vec{k}) - \mu]v_x^2(\vec{k})\tau(\vec{k})\frac{\partial n_0(\vec{k})}{\partial T}d\vec{k}}$$

CONDUCTIVIDAD TÉRMICA DE LOS METALES

$$d\vec{k} = dS_\varepsilon \frac{d\varepsilon}{\hbar v(\vec{k})}$$

$$\chi = \int_\varepsilon (\varepsilon - \mu) v_x^2(\varepsilon)\tau(\varepsilon)g(\varepsilon)\frac{\partial n_0(\varepsilon)}{\partial T}\,d\varepsilon$$

$\frac{\partial n_0}{\partial T}$ sólo varía apreciablemente en el entorno de ε_F

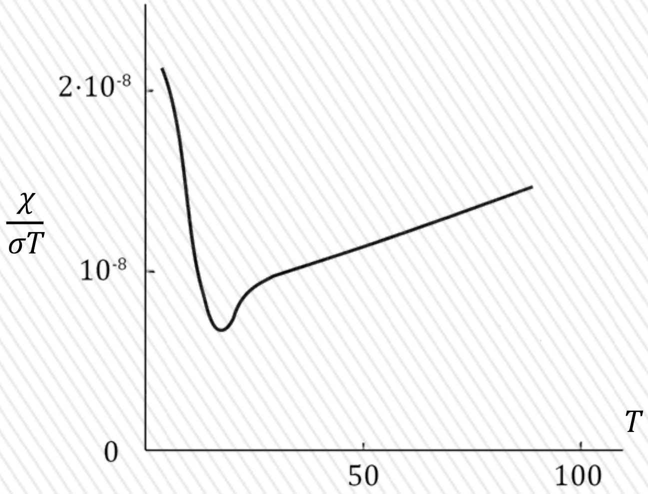
$$\tau(\varepsilon) \approx \tau(\varepsilon_F)$$

$$v^2(\varepsilon) \approx v_F^2$$

$$\chi \approx \frac{1}{3} v_F^2 \tau(\varepsilon_F) c_V$$

Ley de Wiedemann-Franz

$$\boxed{\frac{\chi}{\sigma T} = \frac{\pi^2}{3}\left(\frac{k_B}{e}\right)^2}$$



EFECTOS TERMOELÉCTRICOS

Sólido sometido a un campo eléctrico y un gradiente de temperatura.

$$n(\vec{k}) \approx n_0(\vec{k}) + \frac{e}{\hbar}\tau(\vec{k})\vec{E}\cdot\frac{\partial n_0(\vec{k})}{\partial \vec{k}} - \tau(\vec{k})\,\frac{\partial n_0(\vec{k})}{\partial T}\vec{v}(\vec{k})\cdot\frac{\partial T}{\partial \vec{r}}$$

Densidad de corriente

$$j_x \approx \sigma E_x + \frac{e}{4\pi^3}\int_{ZB}\tau(\vec{k})v_x^2(\vec{k})\frac{\partial n_0(\vec{k})}{\partial T}\frac{\partial T}{\partial x}d\vec{k} = \cdots = \sigma E_x + \frac{\pi^2}{9}ev_F^2\tau(\varepsilon_F)k_B^2 g'(\varepsilon_F)T\frac{\partial T}{\partial x}$$

$$j_x \approx L^{11}E_x + L^{12}(-\nabla_x T)$$

Un gradiente de temperatura produce una corriente eléctrica.

Flujo de calor

$$j_{Q,x} \approx -\chi\frac{\partial T}{\partial x} + \frac{e}{4\pi^3\hbar}E_x\int_{ZB}[\varepsilon(\vec{k})-\mu]\tau(\vec{k})v_x(\vec{k})\frac{\partial n_0(\vec{k})}{\partial k_x}d\vec{k} = -\chi\frac{\partial T}{\partial x} - \frac{\pi^2}{9}ev_F^2\tau(\varepsilon_F)(k_BT)^2 g'(\varepsilon_F)E_x$$

$$j_{Q,x} \approx L^{21}E_x + L^{22}(-\nabla_x T)$$

Un campo eléctrico produce un flujo de calor.

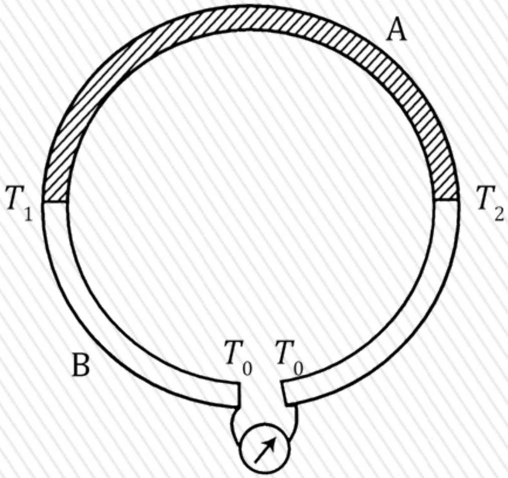
EFECTOS TERMOELÉCTRICOS

Electrones libres

$$L^{12} = -\frac{\pi^2}{6}\frac{k_B}{e}\left(\frac{k_B T}{\varepsilon_F}\right)\sigma = -\frac{\pi^2}{6}\frac{k_B}{e}\left(\frac{k_B T}{\varepsilon_F}\right)L^{11} \qquad L^{21} = -\frac{\pi^2}{6}\frac{k_B}{e}\left(\frac{k_B T}{\varepsilon_F}\right)T\sigma$$

Efecto Seebeck

En circuito abierto: $E_x = \frac{L^{12}}{L^{11}}\nabla_x T \equiv \alpha \nabla_x T$ α ≡ Coeficiente Seebeck



$$\varepsilon + \oint \vec{E}\cdot d\vec{l} = \varepsilon + \oint \alpha \vec{\nabla} T \cdot d\vec{l} = 0$$

$$\int_{T_1}^{T_2} \alpha_{\mathrm{A}} dT + \int_{T_1}^{T_2} \alpha_{\mathrm{B}} dT = \int_{T_1}^{T_2} (\alpha_A - \alpha_B) dT = -\varepsilon$$

TIEMPOS DE COLISIÓN Y PROBABILIDADES DE TRANSICIÓN

$$\boxed{W(\vec{k},\vec{k}')??}$$

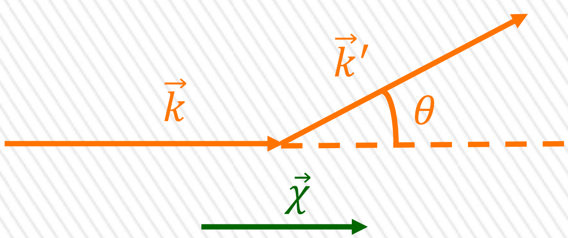
- Los potenciales dispersivos son débiles y con simetría esférica
- Las bandas dependen sólo del módulo del vector de onda
- Los procesos de dispersión son elásticos

$$W(\vec{k},\vec{k}') = \frac{2\pi}{\hbar}\delta[\varepsilon(k)-\varepsilon(k')]\sum_{i,f}\left|\left\langle \psi^{i}_{\vec{k}}\middle|U_{disp}(r)\middle|\psi^{f}_{\vec{k}'}\right\rangle\right|^2$$

En situaciones no muy alejadas del equilibrio

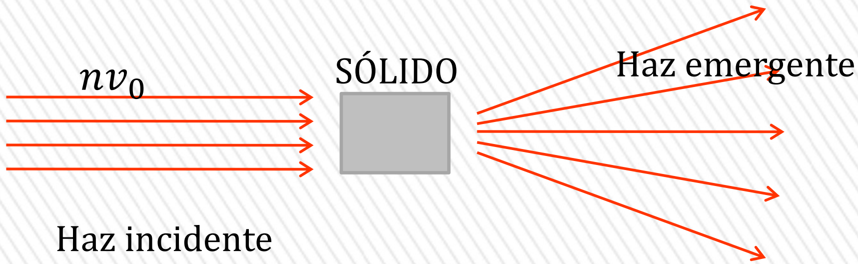
$$n(\vec{k}) = n_0(\vec{k}) + \frac{\partial n_0(\vec{k})}{\partial \vec{k}}\vec{\Lambda}(\vec{k}) = n_0(\vec{k}) + \frac{\partial n_0(\vec{k})}{\partial \varepsilon}\vec{k}\cdot\vec{\chi}(\vec{k})$$

$$\frac{1}{\tau(\vec{k})} = \frac{V}{4\pi^3}\int_{ZB} W(\vec{k}',\vec{k})\left\{1-\frac{\vec{k}'\cdot\vec{\chi}}{\vec{k}\cdot\vec{\chi}}\right\}d\vec{k}'$$



$$\boxed{\frac{1}{\tau} = \int W(\theta)(1-\cos\theta)d\Omega'}$$

ELEMENTOS DE LA TEORÍA DE LA DISPERSIÓN



Sección eficaz diferencial $$dN = nv_0\sigma(\varepsilon,\theta)d\Omega$$

Área virtual en torno a cada centro receptor que delimita las partículas dispersadas por él.

Sección eficaz total $$\sigma(\varepsilon)) = \int_\Omega \sigma(\varepsilon,\theta)d\Omega$$

N centros dispersores

$$n_{dis} = \sigma(\varepsilon,\theta)Nnv_0$$

$$n_{dis} = W(\varepsilon,\theta)n$$

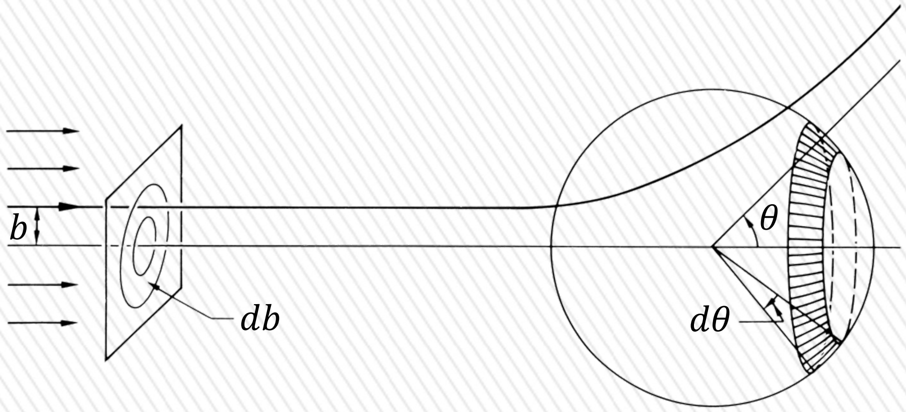
$$\sigma(\varepsilon,\theta) = \frac{n_{dis}/N}{nv_0} = \frac{W(\varepsilon,\theta)}{Nv_0}$$

$$\tau = \frac{1}{\sigma N v_0}$$

$$\boxed{W = \sum_i W_i}$$

$$\boxed{\frac{1}{\tau} = \sum_i \frac{1}{\tau_i}}$$

DISPERSIÓN POR IMPUREZAS CARGADAS



$$b = \frac{Ze^2}{4\pi\kappa}\frac{1}{2\varepsilon}cot\frac{\theta}{2}$$

$$nv_0 2\pi b|db| = \ nv_0 2\pi\ \sigma(\varepsilon,\theta)\ sen\ \theta|d\theta|$$

$$|db| = \frac{Ze^2}{4\pi\kappa}\frac{1}{4\varepsilon}\frac{1}{sen^2\frac{\theta}{2}}|d\theta|$$

$$\boxed{\sigma(\varepsilon,\theta) = \left(\frac{Ze^2}{4\pi\kappa}\right)^2\left(\frac{1}{4\varepsilon}\right)^2\frac{1}{sen^4\frac{\theta}{2}}}$$

Fórmula de Rutherford

DISPERSIÓN POR IMPUREZAS CARGADAS

$$W(\varepsilon,\theta) = \sigma(\varepsilon,\theta)v(\varepsilon)n_I$$

$$\frac{1}{\tau(\varepsilon)} = 2\pi n_I v(\varepsilon)\int_{\theta_{mín}}^{\pi} \sigma(\varepsilon,\theta)(1-\cos\theta)\,sen\,\theta\,d\theta$$

El valor del parámetro de impacto está acotado superiormente por la distancia promedio entre impurezas

$$b_{máx} \approx \frac{1}{2}n_I^{-1/3} \quad \Rightarrow \quad \cot\frac{\theta_{mín}}{2} = \frac{8\pi\kappa\varepsilon}{Ze^2}b_{máx} = \frac{4\pi\kappa\varepsilon}{Ze^2 n_I^{1/3}}$$

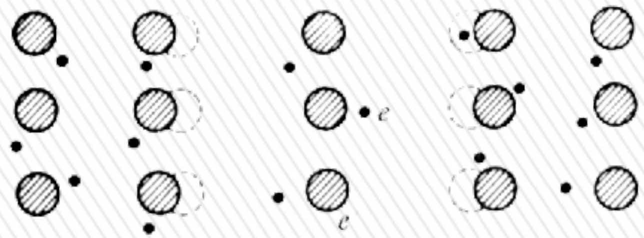
$$\tau(\varepsilon) = 8\pi\frac{(2m^*)^{1/2}\kappa^2}{Z^2e^4n_I\,ln\left[1+\left(\frac{4\pi\kappa\varepsilon}{Ze^2n_I^{1/3}}\right)^2\right]}\varepsilon^{3/2}$$

Fórmula de Conwell-Weisskopf

Potencial de Thomas-Fermi

$$U(r) = \frac{Ze^2}{4\pi\kappa r}e^{-r/\lambda} \quad \Rightarrow \quad \boxed{\mu(T) \propto m^{*\,1/2}\,T^{3/2}}$$

DISPERSIÓN POR FONONES



Interacción electrón – fonón

Creación

$$\varepsilon'(\vec{k}') = \varepsilon(\vec{k}) - \hbar\omega_{\vec{q}}$$
$$\vec{k}' = \vec{k} - \vec{q}$$
$$n'_{\vec{q}} = n_{\vec{q}} + 1$$

Absorción

$$\varepsilon'(\vec{k}') = \varepsilon(\vec{k}) + \hbar\omega_{\vec{q}}$$
$$\vec{k}' = \vec{k} + \vec{q}$$
$$n'_{\vec{q}} = n_{\vec{q}} - 1$$

$$\frac{\hbar^2(\vec{k} \pm \vec{q})^2}{2m^*} = \frac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m^*} \pm \hbar\omega_{\vec{q}} \rightarrow q^2 \pm 2kq\cos\varphi \mp \frac{2m^*}{\hbar}v_s q = 0$$

$$\omega_{\vec{q}} \approx v_s\, q$$

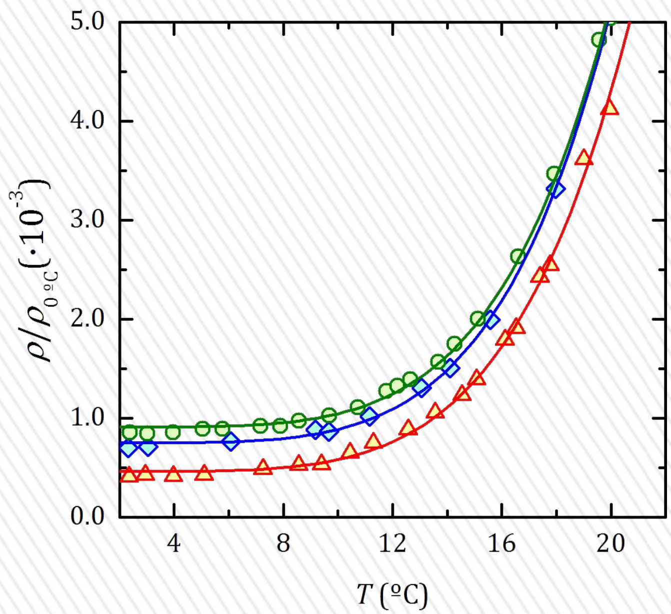
$$q = \mp 2k\cos\varphi \pm \frac{2m^*}{\hbar}v_s \approx \mp 2k\cos\varphi \rightarrow \boxed{\varepsilon'(\vec{k}') \approx \varepsilon(\vec{k})}$$

DISPERSIÓN POR FONONES

$$\frac{1}{\tau(\vec{k})} = \frac{V}{4\pi^3}\int_{ZB} W^+(\vec{k},\vec{k}')\left(1-\frac{\vec{k}'\cdot\vec{\chi}}{\vec{k}\cdot\vec{\chi}}\right)d\vec{k}' + \frac{V}{4\pi^3}\int_{ZB} W^-(\vec{k},\vec{k}')\left(1-\frac{\vec{k}'\cdot\vec{\chi}}{\vec{k}\cdot\vec{\chi}}\right)d\vec{k}'$$

$$W^+(\vec{k},\vec{k}') = \frac{4\pi}{9}\frac{C^2q^2}{NM\omega_{\vec{q}}}(n_{\vec{q}}+1)\delta(\varepsilon-\varepsilon'-\omega_{\vec{q}})$$

$$W^-(\vec{k},\vec{k}') = \frac{4\pi}{9}\frac{C^2q^2}{NM\omega_{\vec{q}}}n_{\vec{q}}\delta(\varepsilon-\varepsilon'+\omega_{\vec{q}})$$



$$\tau(\varepsilon) = \frac{\tau_0}{Tm^{*3/2}}\frac{1}{\varepsilon^{1/2}}$$

$$\tau_0 = \frac{9\sqrt{2}\pi}{8}\frac{\hbar^4 M v_s^2}{C^2 a^3 k_B}$$