

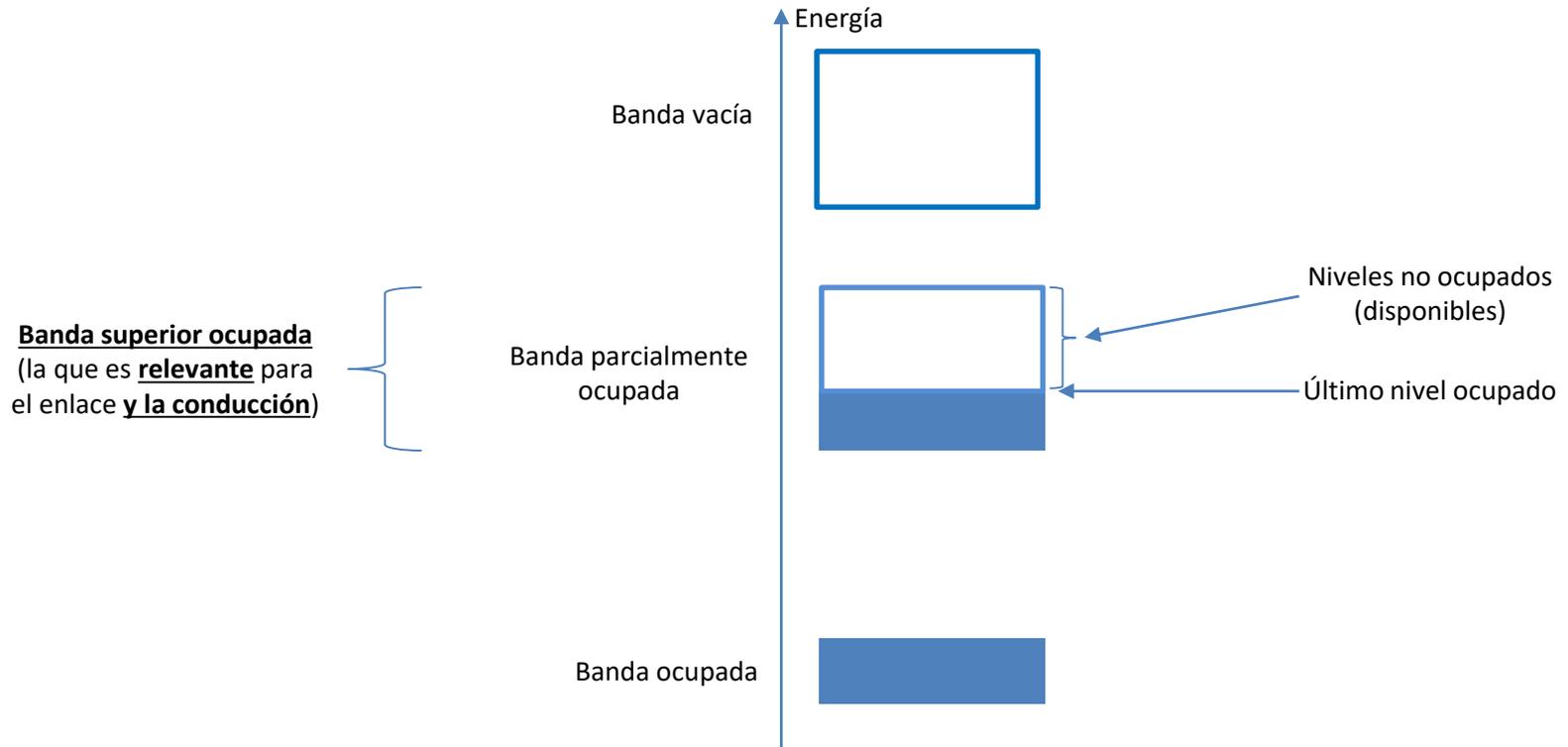
Física del Estado Sólido I

Tema 3: Gas de Fermi de electrones libres

Tema 3: Gas de Fermi de electrones libres

En los metales, la última banda de energía ocupada (de mayor energía) está ocupada parcialmente.

Por ello, los electrones tienen acceso a niveles de energía inmediatamente superiores al último ocupado, lo que permite una buena conductividad eléctrica.



En el enlace metálico cada átomo aporta cierto número de electrones a un “gas de Fermi” de electrones. Estos electrones se mueven, en buena aproximación, libremente por el cristal

Tema 3: Gas de Fermi de electrones libres

Queremos comprender las propiedades físicas de los metales en función de un modelo simple pero bastante efectivo en muchos casos

El modelo de electrones libres

En este modelo los electrones de conducción se mueven de una forma (casi) completamente libre a través del volumen del metal.

Los consideraremos partículas en una caja (limitada por la superficie el metal)

Es especialmente útil para aquellas propiedades que dependen esencialmente de las propiedades cinéticas de los electrones de conducción.

Tema 3: Gas de Fermi de electrones libres

Este modelo es muy buena aproximación en ciertos casos: experimentalmente se demuestra que un electrón de conducción, en muestras puras y a baja T , puede moverse a lo largo de muchas distancias atómicas sin colisionar (10^8 veces el espaciado interatómico)

¿Por qué?

Un electrón de conducción casi no interactúa con:

- los núcleos iónicos distribuidos en una red periódica
- otros electrones de conducción, debido al principio de exclusión de Pauli

Antes de continuar, vamos a repasar e introducir brevemente varios elementos necesarios para este y los próximos temas:

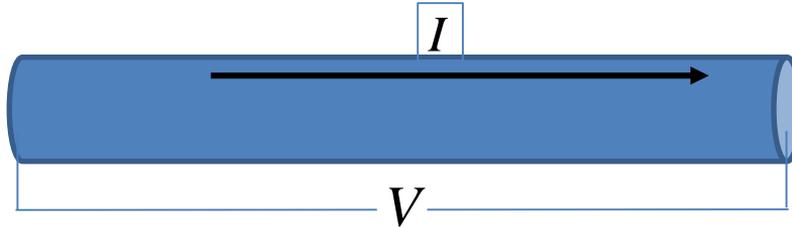
- ley de Ohm
- números complejos
- física cuántica

Repaso Ley de Ohm

Tema 3: Gas de Fermi de electrones libres

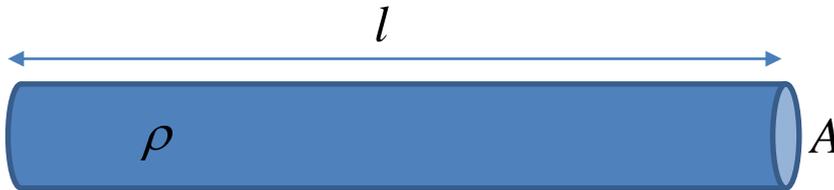
Repaso de la ley de Ohm

Al aplicar un voltaje V a un hilo u objeto con resistencia R , pasará una corriente I por el mismo. Se cumple:



$$V = I \cdot R$$

Cada material posee una resistividad, ρ , característica. Sólo depende del material, no de su geometría (la resistencia R sí depende, además del material, de su geometría). Si el objeto tiene una sección de área constante A y tiene una longitud l , su resistencia y su resistividad están relacionadas por:



$$R = \rho \frac{l}{A}$$

Se define también la conductividad del material, σ , que es la inversa de la resistividad

$$\sigma = \rho^{-1}$$

Tema 3: Gas de Fermi de electrones libres

Repaso de la ley de Ohm

Explicación clásica de la ley de Ohm: los electrones se mueven libremente por el metal en todo momento, salvo por las colisiones con los iones de la red.

En ausencia de campo eléctrico, no hay corriente porque estadísticamente los electrones se mueven en todas direcciones, dando lugar a una corriente neta igual a cero.

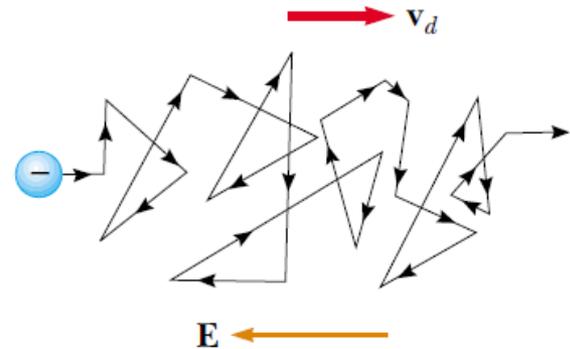
Cuando se aplica un campo eléctrico, aparece una velocidad de deriva neta, v_d , de los electrones.

Los electrones siguen colisionando (punto de vista microscópico), pero en promedio aparece un movimiento neto (punto de vista macroscópico) con velocidad v_d .

La velocidad de los e- entre colisión y colisión puede llegar a ser muy alta. La de deriva es la velocidad neta.

Estadísticamente, se habla de:

- recorrido libre medio entre colisiones
- tiempo medio entre colisiones

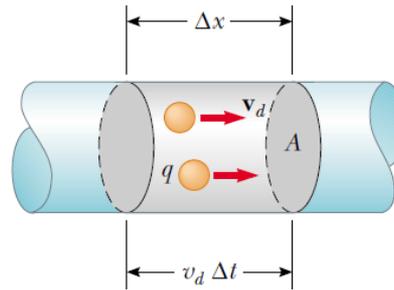


Tema 3: Gas de Fermi de electrones libres

Repaso de la ley de Ohm

Definición de corriente, I : es la carga eléctrica por unidad de tiempo que pasa por un conductor.

La corriente, I , está relacionada directamente con la velocidad de deriva, v_d , la densidad de portadores de carga, n , la carga de los mismos, q , y el área del conductor A .



$$I = \frac{\Delta Q}{\Delta t} = nqv_d A$$

El sentido de la corriente es, por definición, el de las cargas positivas.

Ejercicio intro1: Obtener la velocidad de deriva de los electrones en un hilo de Cu de radio 0,815 mm que transporta una corriente de 1 A. Calcular n suponiendo que cada átomo aporta 1 electrón al gas de electrones.

Datos: Cu tiene red de Bravais FCC con base simple y con parámetro de red $a = 0,36$ nm. $q = e = 1,6 \times 10^{-19}$ C

Tema 3: Gas de Fermi de electrones libres

Repaso de la ley de Ohm

También es muy útil la magnitud densidad de corriente, \mathbf{J} .

- es un vector (a diferencia de la corriente I , que es un escalar)

- su módulo es igual a la corriente por unidad de área

$$J \equiv \frac{I}{A} = nqv_d$$

- su dirección es paralela al campo eléctrico aplicado, \mathbf{E} .

- En la mayoría de los metales, \mathbf{J} y \mathbf{E} son *proporcionales*

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

Ley de Ohm, siendo σ la conductividad $\sigma = \frac{1}{\rho}$

Ejercicio intro2: Demostrar que la expresión $V = IR$ es igual que $\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}$

Números complejos

Tema 3: Gas de Fermi de electrones libres

Números complejos

Un número complejo tiene una parte real y una parte imaginaria:

$$c = a + ib$$

Donde

- $i = \sqrt{-1}$ es el número imaginario. Por tanto, se cumple $i \cdot i = i^2 = -1$
- a y b son números reales

El complejo conjugado del número complejo c es: $c^* = a - ib$

Suma de números complejos:

$$\text{Si tenemos } c_1 = a_1 + ib_1 \quad c_2 = a_2 + ib_2 \quad \Rightarrow \quad c_1 + c_2 = (a_1 + a_2) + i(b_1 + b_2)$$

Multiplicación de números complejos:

$$\text{Si tenemos } c_1 = a_1 + ib_1 \quad c_2 = a_2 + ib_2 \quad \Rightarrow \quad c_1 \cdot c_2 = (a_1 \cdot a_2 - b_1 \cdot b_2) + i(a_1 \cdot b_2 + b_1 \cdot a_2)$$

Ejercicio intro3: demostrarlo

Tema 3: Gas de Fermi de electrones libres

Números complejos

División con números complejos:

$$\frac{1}{c} = \frac{1}{a+ib} = \frac{a-ib}{a^2+b^2}$$

Ejercicio intro4: demostrarlo

Ejercicio intro5: escribir i^{-1} y $\frac{1}{1+i}$ en la forma $c = a + ib$

El número complejo $e^{i\beta}$ se define: $e^{i\beta} = \cos \beta + i \operatorname{sen} \beta$

se cumple que

$$\cos \beta = \frac{e^{i\beta} + e^{-i\beta}}{2}$$

$$\operatorname{sen} \beta = \frac{e^{i\beta} - e^{-i\beta}}{2i}$$

Ejercicio intro6: demostrar las dos últimas relaciones matemáticas a partir de la de $e^{i\beta}$

Ejercicio intro7: demostrar que $(e^{i\beta})^* = e^{-i\beta}$

Tema 3: Gas de Fermi de electrones libres

Números complejos

El módulo del número complejo $c = a + ib$ es: $|c| = \sqrt{a^2 + b^2}$

Propiedad: $|c|^2 = c \cdot c^* \Rightarrow |c| = \sqrt{c \cdot c^*}$

Ejercicio intro8: Demostrarlo

Ejercicio intro9: Demostrar que $|e^{i\beta}| = 1$ sea cual sea el valor de β (si es un número real)

Cualquier número complejo $c = a + ib$ se puede escribir de la siguiente forma:

$$c = |c| e^{i\beta} \quad \text{siendo} \quad \beta = \arctg\left(\frac{b}{a}\right)$$

Ejercicio intro10: Escribir $c = 1 + i$ en la forma $c = |c| e^{i\beta}$

Repaso física cuántica

Tema 3: Gas de Fermi de electrones libres

Física cuántica

Ecuación de Schrödinger estacionaria (independiente del tiempo): toma la forma

$$H\psi = E \cdot \psi \quad \Rightarrow \quad \boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V\psi = E \cdot \psi}$$

donde:

- E es la energía asociada a la *f.d.o.*
- $V(\vec{r})$ es el potencial (en nuestro caso, el del cristal)
- $\psi(\vec{r})$ es la función de onda (*f.d.o.*)

Las soluciones que obtenemos son las *f.d.o.* posibles, $\psi(\vec{r})$, y sus energías E asociadas.

Las soluciones están determinadas por $V(\vec{r})$ y las *condiciones de contorno*.

Recordemos que $\psi(\vec{r})$ es en general una función compleja y que $|\psi(\vec{r})|^2 = \psi(\vec{r}) \cdot \psi^*(\vec{r})$ es la densidad de probabilidad, proporcional a la probabilidad de encontrar a la partícula en la posición \vec{r}

Tema 3: Gas de Fermi de electrones libres

Física cuántica

Principio de *de Broglie*

Una partícula con momento lineal \vec{p} tiene asociada una longitud de onda λ dada por:

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

siendo $h = 6,63 \times 10^{-34} \text{ Js}$ la constante de Planck

por tanto, el número de onda $k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{p}{\hbar}$ siendo $\hbar = h/2\pi$ una cte.

y
$$p = \hbar k$$

Por tanto, el vector de onda de una partícula libre representa su momento lineal

Tema 3: Gas de Fermi de electrones libres

Física cuántica

Ejercicio intro10

Aplicación de la ecuación de Schrödinger

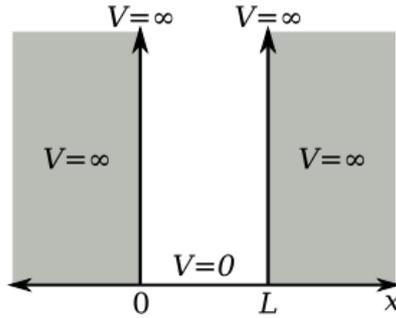
- a) demostrar que las *f.d.o.* $\psi_1(x) = Ae^{ikx}$ y $\psi_2(x) = Be^{-ikx}$, donde A y B son números reales, son soluciones de la ec. Schrödinger en el vacío (en el vacío $V = 0$). Considerar únicamente una dimensión (x). Para hacerlo, aplicar las operaciones que indica la ecuación de Schrödinger (con $V = 0$) sobre las *f.d.o.* y detallar qué relación debe haber entre la energía E y el número de onda k .
- b) A partir del principio de *de Broglie* hallar la relación entre E y el momento del electrón p .
- c) Hallar la densidad de probabilidad de encontrar al electrón en un punto cualquiera del espacio.

Tema 3: Gas de Fermi de electrones libres

Partícula en una caja unidimensional

Ejemplo de aplicación de la ecuación de Schrödinger

Partícula en una caja (de aplicación directa para el gas de electrones libres)



$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V\psi = E \cdot \psi \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E \cdot \psi & \text{si } 0 < x < L \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \infty \cdot \psi = E \cdot \psi & \Rightarrow \psi = 0 \text{ fuera de la caja} \end{cases}$$

y en $x=0$ y $x=L$

Ejercicio Intro11: obtener las *f.d.o.* y las energías de cada una de ellas. Para ello, utilizar la forma general de la solución dentro de la caja $\psi(x) = Be^{ikx} + Ce^{-ikx}$

hallando B y C , así como los valores posibles de k , a partir de las condiciones de contorno.

Ocupación de niveles electrónicos

Tema 3: Gas de Fermi de electrones libres

Espín y estadísticas en mecánica cuántica (fermiones y bosones)

En mecánica cuántica es necesario incluir un momento angular intrínseco, o ***espín***, para poder explicar el comportamiento de las partículas.

Las partículas se dividen en dos tipos, en función del valor de su espín:

- Espín semientero (fermiones): están regidas por la estadística de Fermi-Dirac, cumplen el principio de exclusión de Pauli. Los electrones, por ejemplo, son fermiones.
- Espín entero (bosones): están regidas por la estadística de Bose-Einstein, no cumplen el ppio. de exclusion de Pauli. Los fotones (de los que está compuesta la luz), por ejemplo, son bosones. En ciertas circunstancias, electrones emparejados pueden comportarse como bosones (superconductores).

Tema 3: Gas de Fermi de electrones libres

Espín y estadísticas en mecánica cuántica (fermiones y bosones)

Los electrones son **fermiones** (*estadística de Fermi-Dirac*) y cumplen el principio de exclusión de Pauli: no puede haber en la misma región del espacio dos electrones con todos los n^{os} cuánticos iguales.

Esto implica que en el estado fundamental (a Temperatura = 0 K) van ocupando los niveles de menor energía. En cada nivel puede haber dos electrones (uno con espín \uparrow y otro con espín \downarrow).

Al nivel ocupado de mayor energía *cuando el sistema está en su estado fundamental* se le llama **nivel de Fermi**.

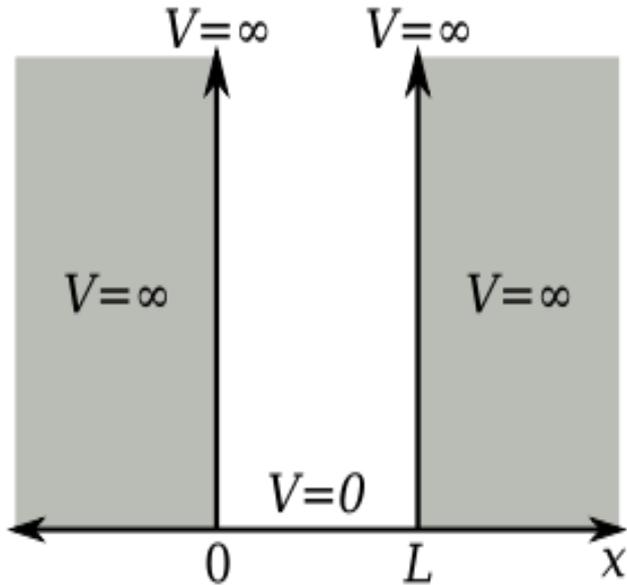
A la energía de ese nivel se le llama **energía de Fermi** (E_F).

El concepto y el valor de la **energía de Fermi** es fundamental en el modelo de electrones libres

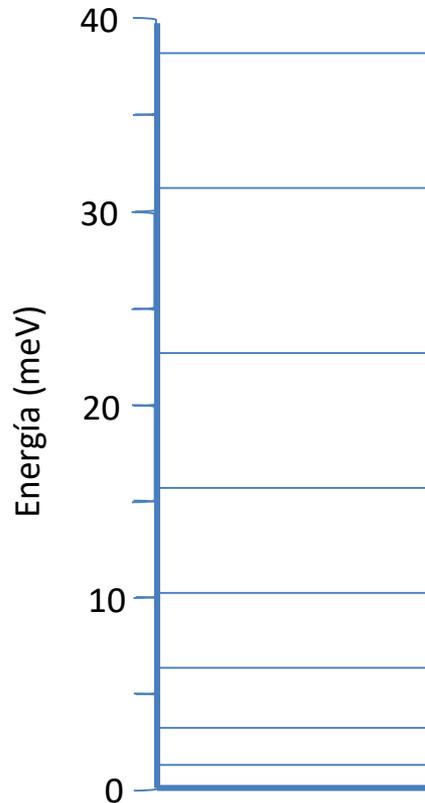
Tema 3: Gas de Fermi de electrones libres

Espín y estadísticas en mecánica cuántica (fermiones y bosones)

Ejemplo del cálculo de la energía de Fermi en la caja 1-D con $N = 14$ electrones dentro



(A completar en clase)



¡¡Depende del número de electrones!! y de la separación entre los niveles

Tema 3: Gas de Fermi de electrones libres

Ejemplo:

Vamos a obtener la **energía de Fermi en la caja 1-D con N electrones dentro**

Las f.d.o. son las siguientes: $\psi(x) = A \cdot \text{sen}(k_n x)$ con $k_n = \frac{n\pi}{L}$ n entero

Y sus niveles de energía asociados son:

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{L} \right)^2 \quad \text{donde } n = 1, 2, 3, \dots \text{ indica el número de nivel}$$

¿Cuál es nivel ocupado de mayor energía (nivel de Fermi)? ¿cuál es su energía (energía de Fermi)?

(A completar en clase)

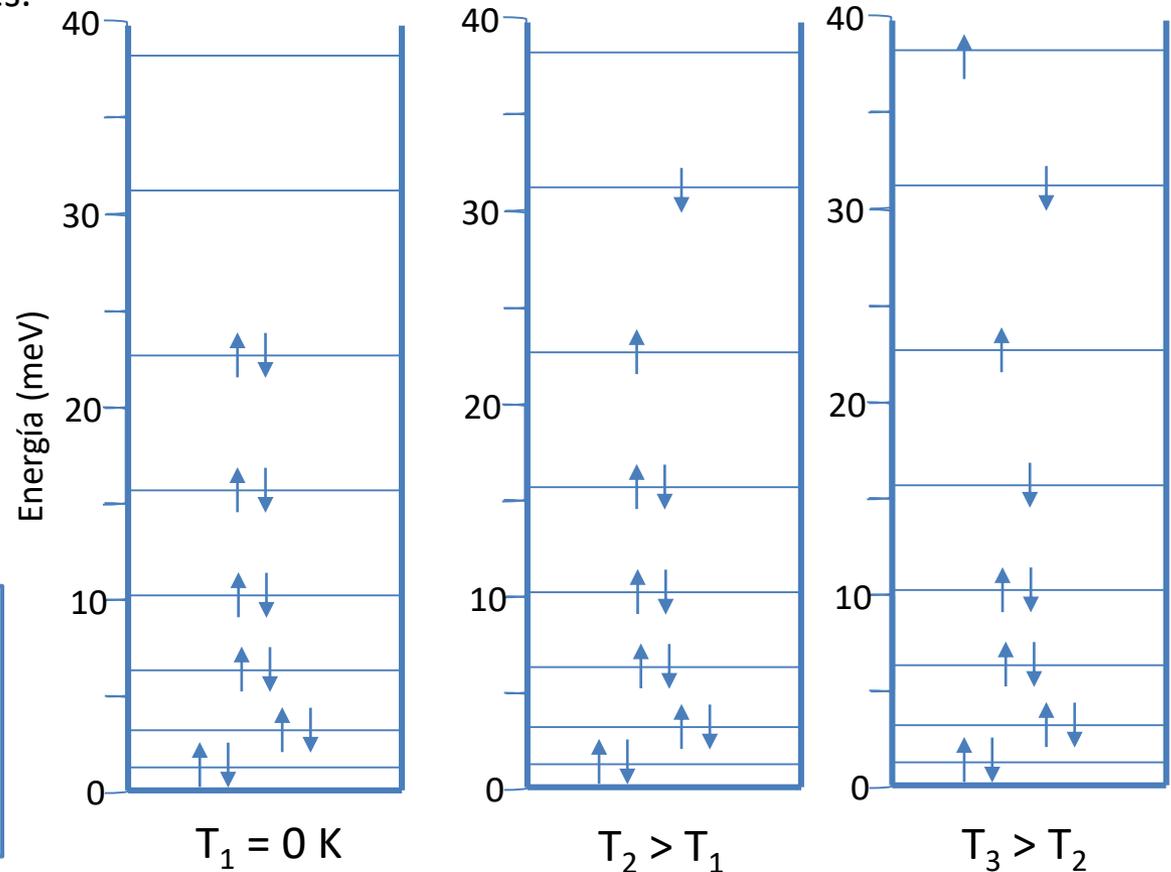
Tema 3: Gas de Fermi de electrones libres

Espín y estadísticas en mecánica cuántica (fermiones y bosones)

¿Qué ocurre al aumentar la temperatura?

La energía térmica ($\approx k_B T$, donde k_B es la constante de Boltzmann $k_B = 1,38 \cdot 10^{-23} J / K$ y *T está expresada en Kelvin*) puede llegar a ser suficientemente alta como para que los electrones lleguen a ocupar niveles electrónicos superiores.

Ejemplo con $N = 12$ electrones



Cuanto mayor es la temperatura,
mayor la probabilidad de que
estén ocupados niveles superiores

Tema 3: Gas de Fermi de electrones libres

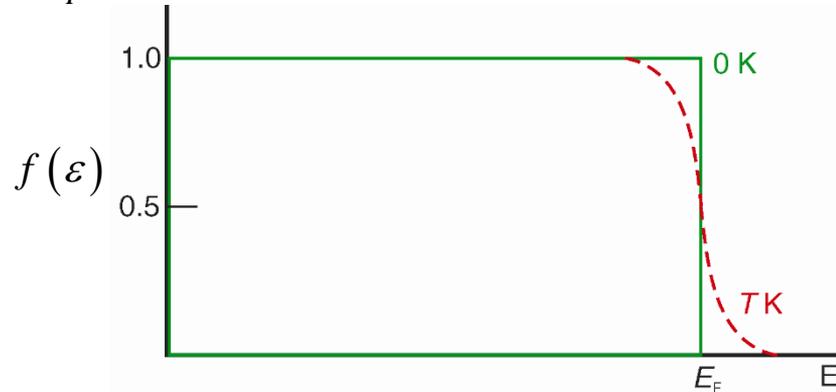
Estadística de Fermi-Dirac

Es la estadística que rige el comportamiento de los fermiones.

Nos da la probabilidad de que un nivel con energía E esté ocupado a una temperatura T en un gas ideal de electrones en equilibrio térmico, del que se conoce E_F .

$$f(E) = \frac{1}{e^{\left[\frac{E-E_F}{k_B T}\right]} + 1}$$

$$k_B = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ J / K}$$



- En el estado fundamental del sistema ($T = 0 \text{ K} = -273.15^\circ\text{C}$), los electrones ocupan los estados de menor energía hasta que se llenan.
 - a) Probabilidad de ocupación de un nivel con $E < E_F$ es 1
 - b) Probabilidad de ocupación de un nivel con $E > E_F$ es 0.
- A temperaturas mayores, $T > 0$, hay probabilidad mayor que 0 de ocupación de niveles con $E > E_F$

Tema 3: Gas de Fermi de electrones libres

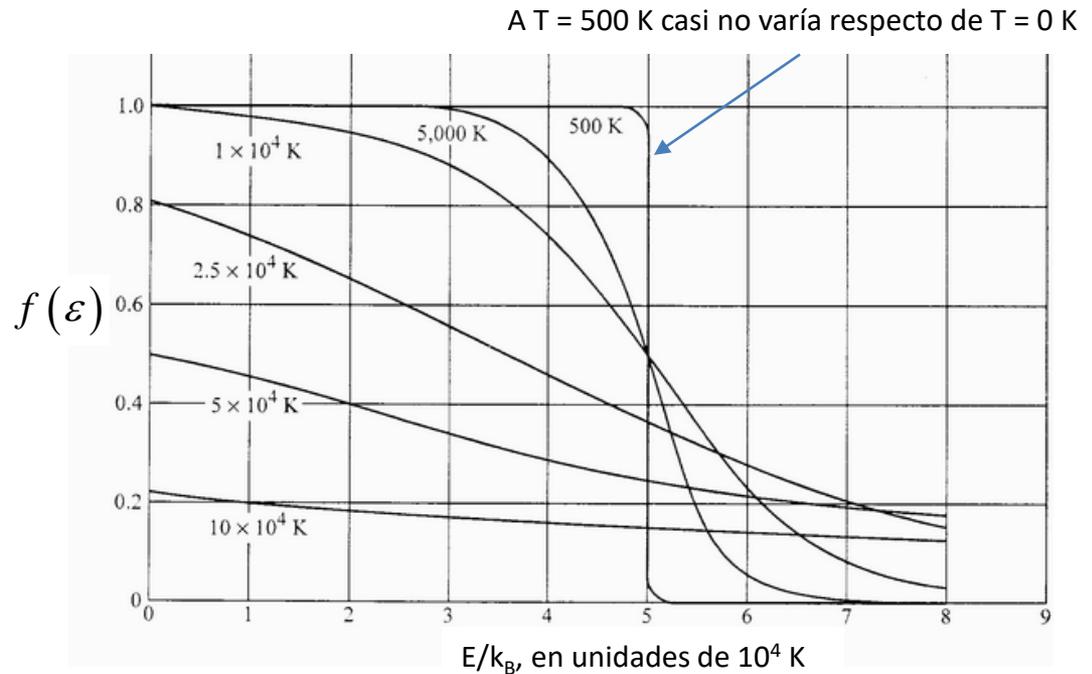
Estadística de Fermi-Dirac

- Cuanto mayor sea T , mayor será la probabilidad de ocupación de niveles con $E > E_F$

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{e^{[(\varepsilon - E_F)/k_B T]} + 1}$$

Evolución con T de la función de Fermi

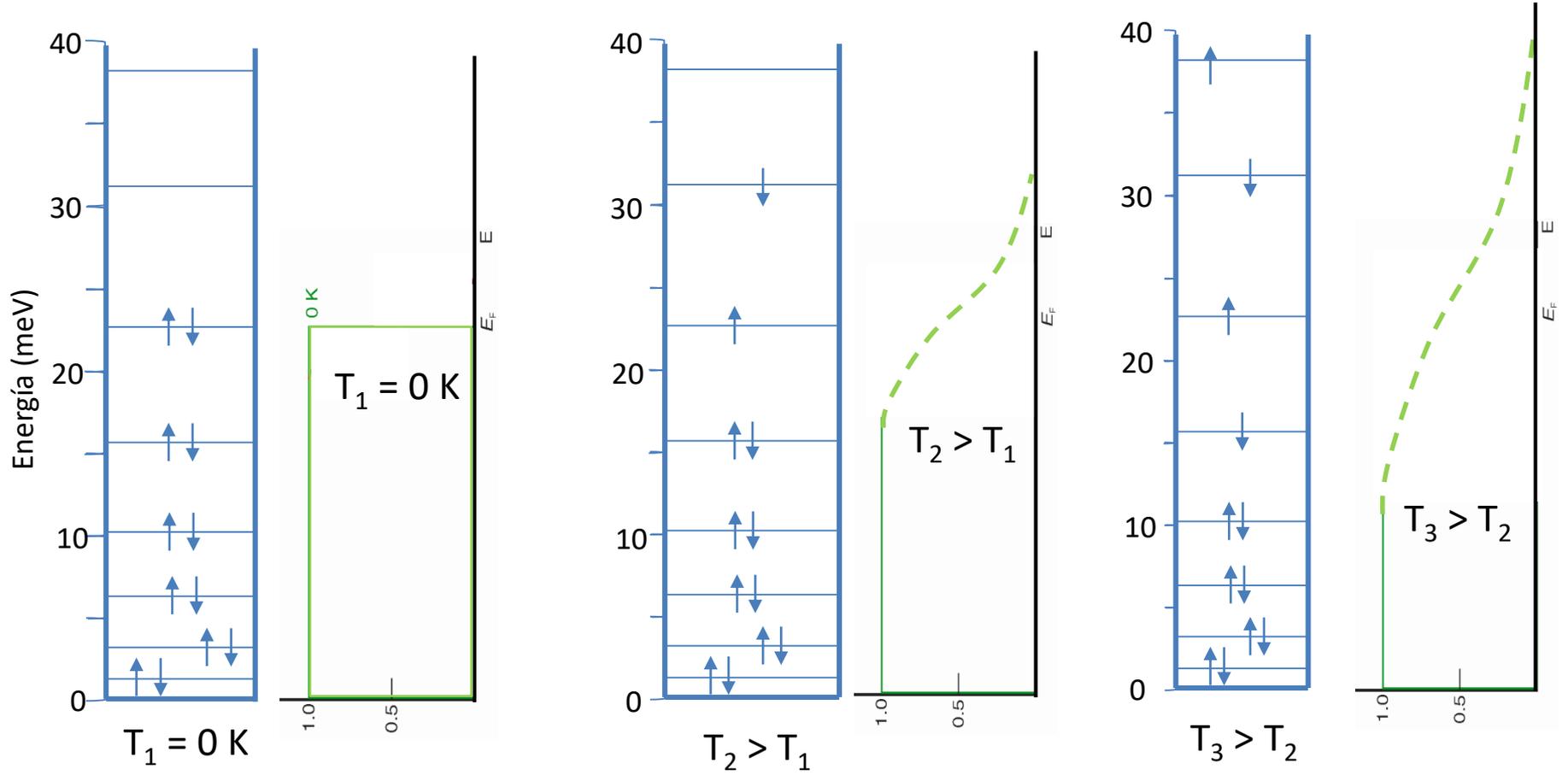
para $E_F = 4,31 \text{ eV}$



La energía de Fermi se puede expresar como una temperatura: **Temperatura de Fermi:** $T_F \equiv \frac{E_F}{k_B}$

Tema 3: Gas de Fermi de electrones libres

Estadística de Fermi-Dirac



Tema 3: Gas de Fermi de electrones libres

Estadística de Fermi-Dirac

- La expresión que usamos es válida para T inferiores a unos 500 K
(realmente, habría que usar μ , potencial químico, en vez de E_F , pero a T no muy altas son muy parecidos)

- La energía térmica a temperatura ambiente es: $k_B T = 1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 295 = 4,07 \cdot 10^{-21} \text{ J} = 0,025 \text{ eV}$

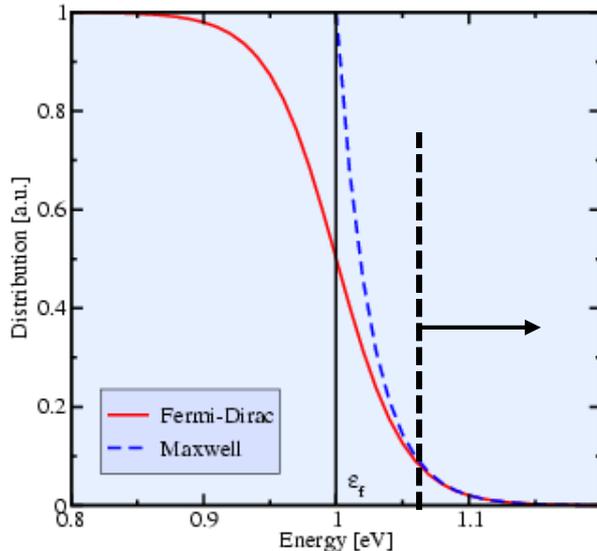
- A energías altas, comparadas con $k_B T$, la estadística de Fermi-Dirac se puede aproximar

$$\text{Si } (\varepsilon - E_F) \gg k_B T \Rightarrow e^{[(\varepsilon - E_F)/k_B T]} \gg 1 \Rightarrow$$

$$f(\varepsilon) \approx e^{-[(\varepsilon - E_F)/k_B T]} \quad \text{si } \varepsilon - E_F \gg k_B T$$

(estadística de Maxwell-Boltzmann)

Se utilizará en semiconductores



Gas de electrones libres

Tema 3: Gas de Fermi de electrones libres

Gas de electrones libres en 3-D (en un cubo)

Queremos resolver la ecuación de Schrödinger en 3-D, en un cubo de lado L . Con ello, obtendremos las f.d.o., los números de onda posibles y las energías asociadas a las mismas.

Dentro del cubo, $V(\vec{r}) = 0$ por lo que la ec. de Schrödinger queda:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial}{\partial x^2} + \frac{\partial}{\partial y^2} + \frac{\partial}{\partial z^2} \right) \psi_k(\vec{r}) = E_k \cdot \psi_k(\vec{r})$$

Para obtener las soluciones, tenemos que imponer las condiciones de contorno. Las impondremos de esta forma: la función de onda tiene que ser periódica en los límites del cubo

$$\text{condiciones de contorno} \left\{ \begin{array}{l} \psi(x+L, y, z) = \psi(x, y, z) \\ \psi(x, y+L, z) = \psi(x, y, z) \\ \psi(x, y, z+L) = \psi(x, y, z) \end{array} \right.$$

Tema 3: Gas de Fermi de electrones libres

Gas de electrones libres en 3-D (en un cubo)

Con esas condiciones de contorno, las *f.d.o.* solución de la ec. Schrödinger son:

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \quad \text{donde} \quad \vec{k} = k_x \hat{u}_x + k_y \hat{u}_y + k_z \hat{u}_z$$

$$\text{y con} \quad k_x = \pm 2 \frac{n_x \pi}{L} \quad \text{con } n_x = 1, 2, 3, 4, \dots \quad ; \quad k_y = \pm 2 \frac{n_y \pi}{L} \quad \text{con } n_y = 1, 2, 3, 4, \dots \quad ; \quad k_z = \pm 2 \frac{n_z \pi}{L} \quad \text{con } n_z = 1, 2, 3, 4, \dots$$

n_x, n_y, n_z son los números cuánticos, que indican el orbital de los electrones libres en el cubo de lado L .

La energía asociada a esta *f.d.o.* es:

$$E_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$$

que depende de los números cuánticos n_x, n_y, n_z

Tema 3: Gas de Fermi de electrones libres

Gas de electrones libres en 3-D (en un cubo)

En este modelo, las energías asociadas a las *f.d.o.* electrónicas son

$$E_k = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$$

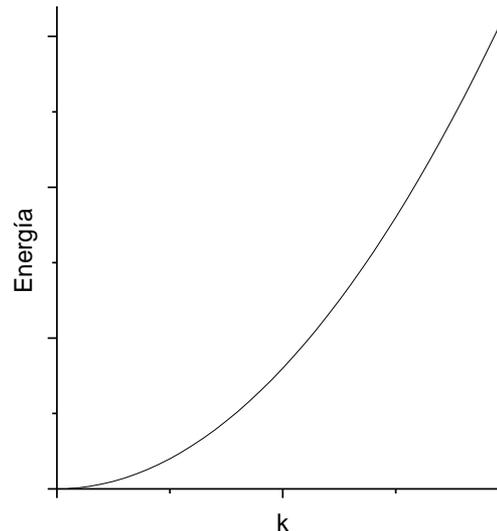
$$\text{con } k_x = \pm 2 \frac{n_x \pi}{L} \quad n_x = 1, 2, 3, 4, \dots \quad k_y = \pm 2 \frac{n_y \pi}{L} \quad n_y = 1, 2, 3, 4, \dots \quad k_z = \pm 2 \frac{n_z \pi}{L} \quad n_z = 1, 2, 3, 4, \dots$$

Esta expresión es la **relación de dispersión**: es la relación entre la energía y el número de onda (momento lineal) de la partícula.

Es una relación importantísima.

Se suele representar gráficamente:

Para electrones libres es una parábola



Tema 3: Gas de Fermi de electrones libres

Gas de electrones libres en 3-D (en un cubo)

Momento lineal y vector de onda

En mecánica cuántica, el momento lineal está representado por el operador $\vec{p} = -i\hbar\vec{\nabla} = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}\right)$

Al aplicarlo sobre la f.d.o. que hemos obtenido para la caja 3-D

$$\vec{p}\psi_k(\vec{r}) =$$

(A completar en clase)

Por tanto, podemos expresar la velocidad de la partícula en función de su vector de onda \vec{k}

$$m\vec{v} = \hbar\vec{k} \quad \Rightarrow \quad \boxed{\vec{v} = \frac{\hbar\vec{k}}{m}}$$

Tema 3: Gas de Fermi de electrones libres

Gas de electrones libres en 3-D (en un cubo)

Energía de Fermi de los electrones en el cubo

Queremos expresar la energía de Fermi en función de los números de onda, k . Para ello, representaremos los orbitales \vec{k} en el “espacio de las k ” (espacio recíproco o espacio de momento lineal).

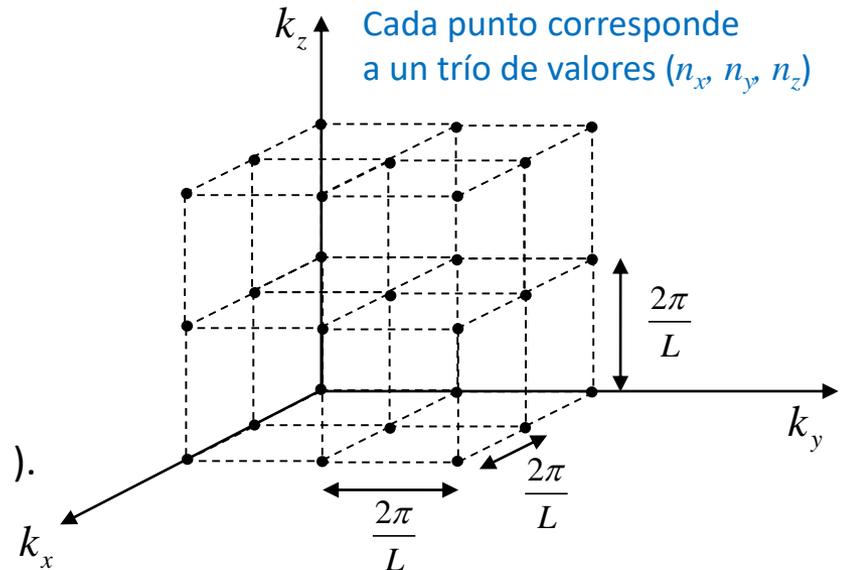
Los orbitales son
$$\vec{k} = \underbrace{\pm 2 \frac{n_x \pi}{L} \hat{u}_x}_{k_x} \pm \underbrace{2 \frac{n_y \pi}{L} \hat{u}_y}_{k_y} \pm \underbrace{2 \frac{n_z \pi}{L} \hat{u}_z}_{k_z} \quad \text{con } n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, 4, \dots$$

forman una red tridimensional periódica de puntos

(en el espacio recíproco) con parámetro de red = $\frac{2\pi}{L}$

Cada punto de esta red

representa 2 orbitales (uno con espín \uparrow y otro con espín \downarrow).



Tema 3: Gas de Fermi de electrones libres

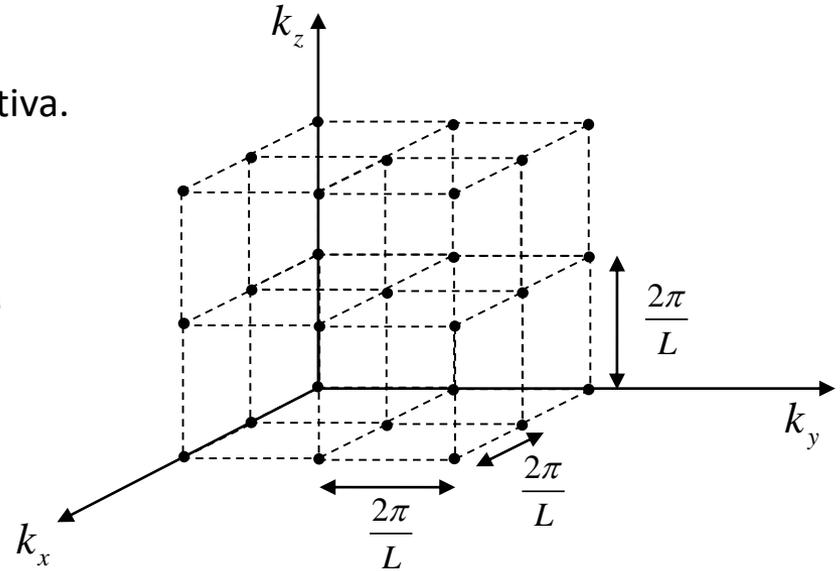
Gas de electrones libres en 3-D (en un cubo)

Energía de Fermi de los electrones en el cubo

La red de Bravais en el espacio recíproco es cúbica primitiva.

El volumen de la celda unidad = $\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3$

Por tanto, a cada punto se le asocia ese volumen $\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3$



La energía depende de k de la siguiente forma:

$$E_k = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$$

Los puntos con igual energía verifican: $k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = \text{constante}$

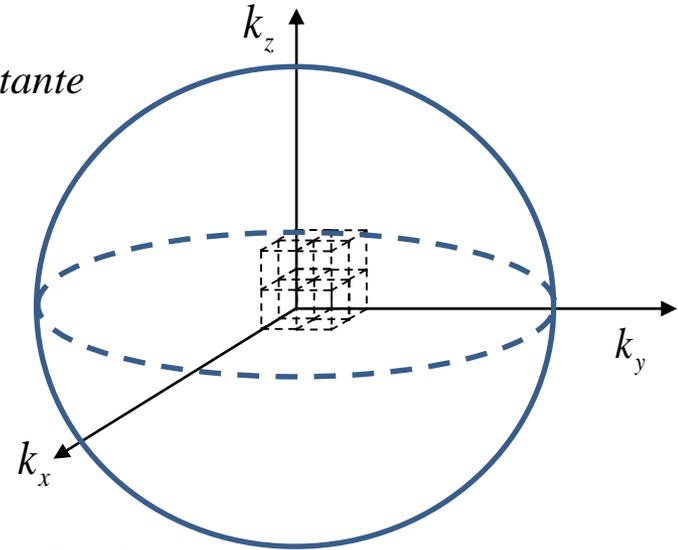
Tema 3: Gas de Fermi de electrones libres

Gas de electrones libres en 3-D (en un cubo)

Energía de Fermi de los electrones en el cubo

Los puntos con igual energía verifican: $k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = \text{constante}$

La superficie que engloba a estos puntos es una esfera



¿Cómo quedan ocupados los orbitales en el estado fundamental ($T = 0 \text{ K}$)?

- Se ocupan los de menor energía (valores más pequeños de k_x, k_y, k_z es decir, de n_x, n_y, n_z).

- Cada orbital \vec{k} será ocupado por 2 electrones.

Tema 3: Gas de Fermi de electrones libres

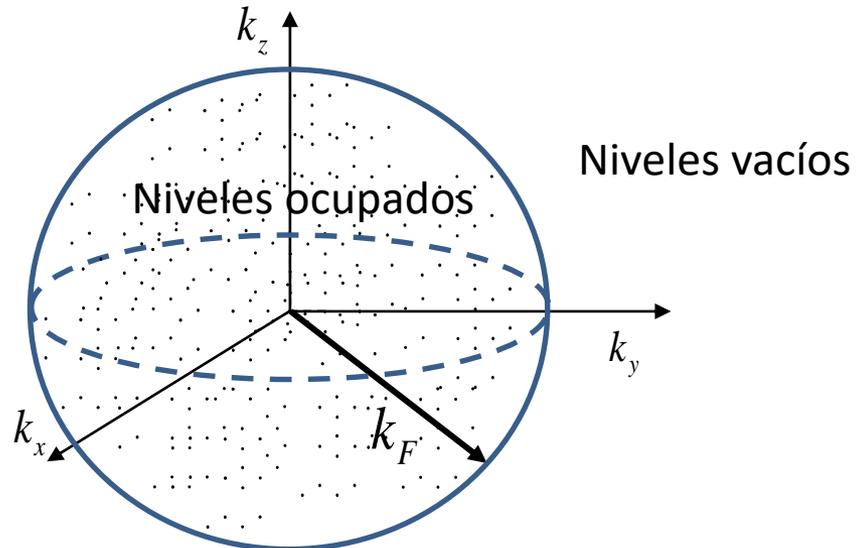
Gas de electrones libres en 3-D (en un cubo)

Energía de Fermi de los electrones en el cubo

Energía de Fermi E_F : energía de los orbitales ocupados con mayor energía (a $T = 0$ K). Todos tienen la misma energía (E_F) y por tanto el mismo valor de número de onda (se denomina número de onda de Fermi, k_F)

La esfera que engloba los niveles de Fermi es la esfera de Fermi. Tiene radio k_F . Los niveles dentro del volumen encerrado en esa esfera están ocupados. Los que están fuera de ella, están vacíos.

Temperatura = 0 K



Tema 3: Gas de Fermi de electrones libres

Gas de electrones libres en 3-D (en un cubo)

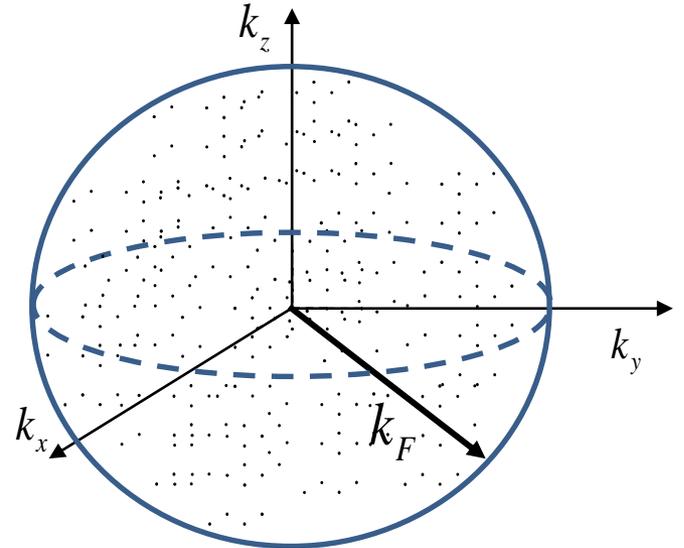
Energía de Fermi de los electrones en el cubo

Los niveles de Fermi tienen una energía

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} k_F^2$$

El volumen encerrado por la esfera de Fermi es

(A completar en clase)



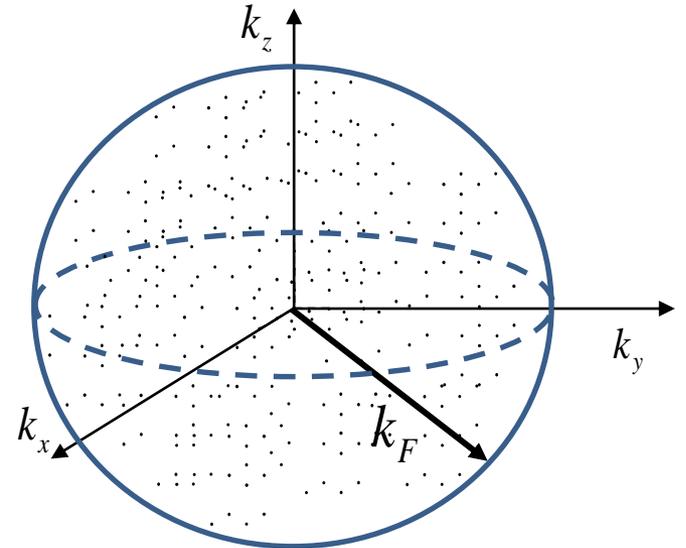
Tema 3: Gas de Fermi de electrones libres

Gas de electrones libres en 3-D (en un cubo)

Energía de Fermi de los electrones en el cubo

Los niveles de Fermi tienen una energía

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} k_F^2$$



Queremos obtener la relación entre la energía de Fermi y el número de electrones, N , y el volumen que tiene nuestro “material” en el espacio real $V = L^3$. De hecho, expresaremos E_F en función de n , la densidad de electrones.

Para ello, vamos a calcular cuántos orbitales están ocupados si tenemos N electrones. Con esto, sabremos el valor de k_F .

Tema 3: Gas de Fermi de electrones libres

Gas de electrones libres en 3-D (en un cubo)

Energía de Fermi de los electrones en el cubo

La relación entre el número de \vec{k} 's ocupados y k_F está dada por la relación entre el volumen de la esfera de Fermi y el de la celda unidad (pues tiene un \vec{k} asociado por celda)

n° de \vec{k} 's en el volumen interior de la esfera de Fermi =

(A completar en clase)

Cada \vec{k} está ocupado por dos electrones (espines opuestos), por tanto:

(A completar en clase)

Tema 3: Gas de Fermi de electrones libres

Gas de electrones libres en 3-D

Energía de Fermi de los electrones en un material de volumen V (cualquier forma)

Expresión general, electrones libres

$$k_F = \sqrt[3]{\frac{3\pi^2 N}{V}} = \sqrt[3]{3\pi^2 n}$$

n es la **densidad de electrones**

Ya podemos obtener el valor de la energía de Fermi:

Expresión general, electrones libres

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} k_F^2 = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3}$$

n es la **densidad de electrones**

Los valores de E_F y k_F sólo dependen de la concentración de electrones.

Es de gran importancia también la velocidad de los electrones que están en los niveles de Fermi:

velocidad de Fermi

$$v_F = \frac{\hbar k_F}{m} = \frac{\hbar}{m} \sqrt[3]{3\pi^2 n}$$

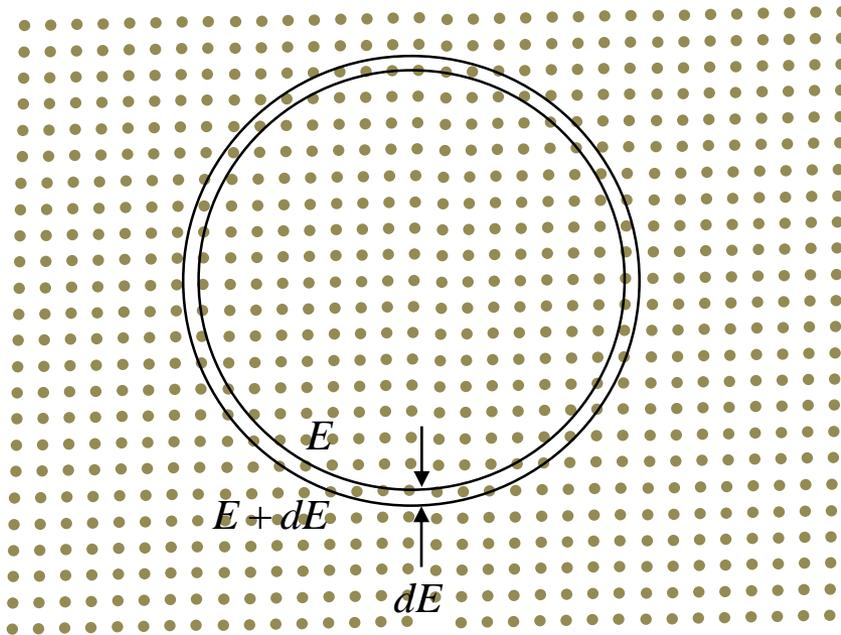
n es la **densidad de electrones**

Tema 3: Gas de Fermi de electrones libres

Gas de electrones libres en 3-D

Densidad de estados

Otra magnitud muy utilizada y de gran importancia para el análisis de las propiedades de los cristales (electrónicas, térmicas,...) es la **densidad de estados**: es el número de orbitales que hay por unidad de intervalo de energía, a una energía dada.



Al número de puntos que hay entre las dos esferas lo llamamos dN

Cada una corresponde a k constante, por tanto a energía constante. La diferencia de energía entre las dos esferas es dE

La densidad de estados se calcula:

$$D(E) \equiv \frac{dN}{dE}$$

la derivada del número de orbitales que hay dentro de la esfera, respecto de su energía

Tema 3: Gas de Fermi de electrones libres

Gas de electrones libres en 3-D

Densidad de estados

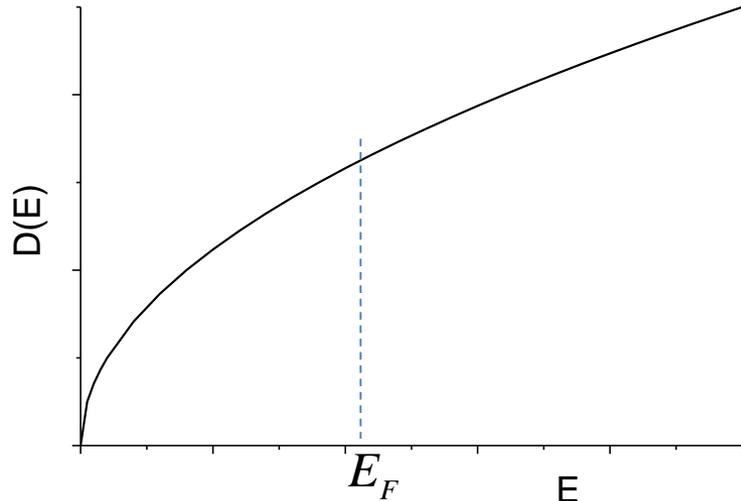
Para electrones libres, sabemos que

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(3\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{2/3} \Rightarrow N =$$

(A completar en clase)

y la densidad de estados es:

(A completar en clase)



Tema 3: Gas de Fermi de electrones libres

Gas de electrones libres en 3-D

Conducción eléctrica y ley de Ohm

Vimos que la cantidad de movimiento \vec{p} de un electrón libre está relacionada con el vector de onda \vec{k}

$$\vec{p} = m\vec{v} = \hbar\vec{k}$$

La fuerza sobre una carga q cuando está en un campo eléctrico \vec{E} y magnético \vec{B} es (ley de Lorentz):

$$\vec{F} = q(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B})$$

Además, 2ª ley de Newton:

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

Por tanto, para electrones libres en presencia de campo eléctrico constante y sin campo magnético

(A completar en clase)

Si no hubiera colisiones, para electrones libres:

(A completar en clase)

Tema 3: Gas de Fermi de electrones libres

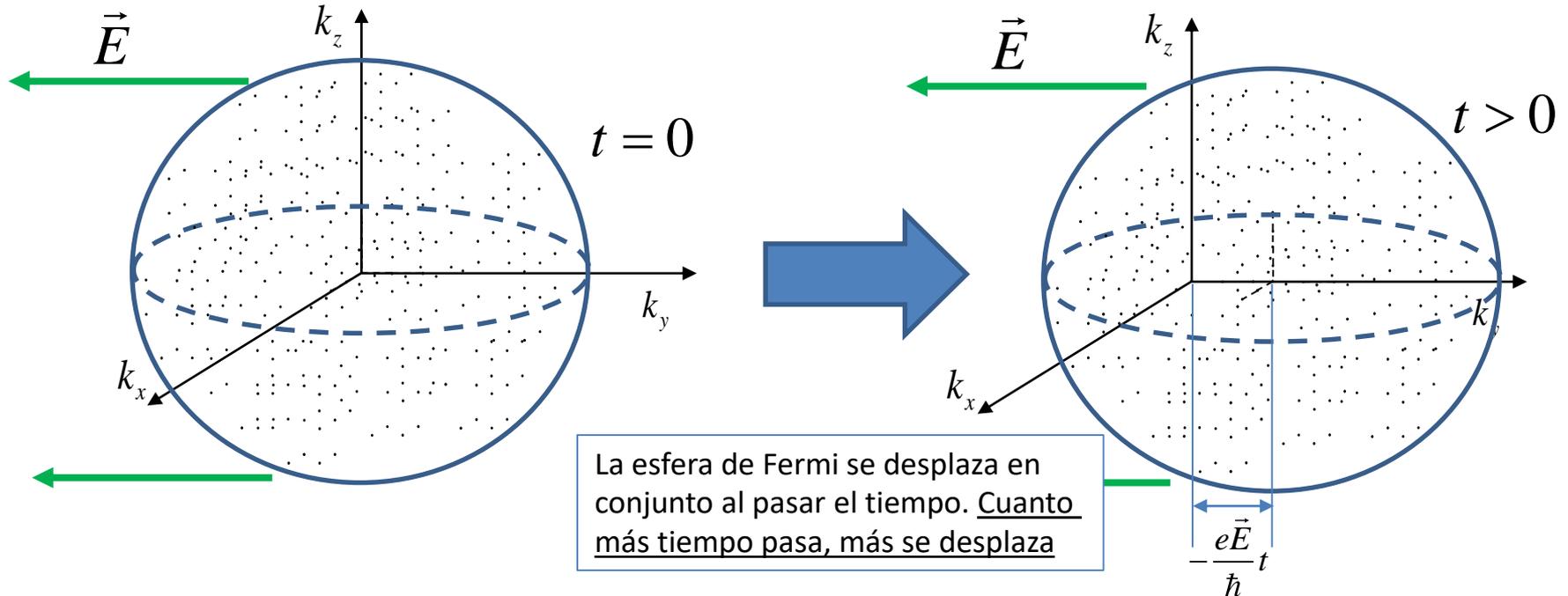
Gas de electrones libres en 3-D

Conducción eléctrica y ley de Ohm

El vector de onda de un electrón libre (sin colisiones) en un campo eléctrico, varía con el tiempo según:

$$\vec{k}(t) - \vec{k}(0) = -\frac{e\vec{E}}{\hbar}t$$

Representamos la esfera de Fermi (dentro de la cual están todos los orbitales ocupados)



Tema 3: Gas de Fermi de electrones libres

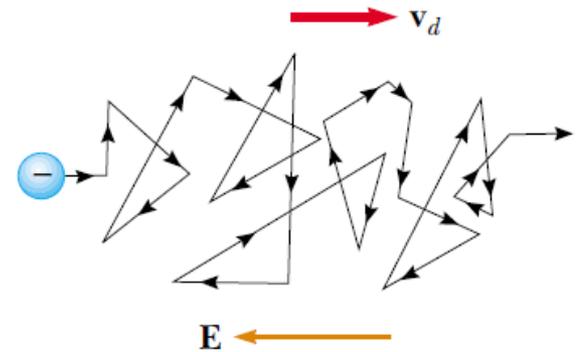
Gas de electrones libres en 3-D

Conducción eléctrica y ley de Ohm

En este modelo de electrones libres, el valor de k va aumentando continuamente al pasar el tiempo. Si mantenemos el campo eléctrico continuamente, los electrones podrían adquirir valores de k (velocidades) tan altas como queramos.

Pero esto no ocurre en los conductores reales debido a las colisiones de los electrones con las imperfecciones de la red:

- defectos: impurezas, vacantes, intersticiales, dislocaciones,...
- vibraciones de la red (*fonones*, Física Estado Sólido II)



Tema 3: Gas de Fermi de electrones libres

Gas de electrones libres en 3-D

Conducción eléctrica y ley de Ohm

En conductores, la combinación del campo eléctrico y las colisiones resulta en un estado estacionario (promedio): la esfera de Fermi se desplaza un valor constante

Al tiempo que transcurre entre colisión y colisión en promedio (tiempo de relajación) lo llamamos τ . Entonces:

$$\delta\vec{k} = -\frac{e\vec{E}}{\hbar}\tau$$

Desplazamiento constante de la esfera de Fermi al aplicar un campo \mathbf{E} a un material con tiempo de relajación τ

Este valor se relaciona directamente con la velocidad de deriva, v_d , que vimos en la ley de Ohm.

$$\vec{v}_d = -\frac{\hbar}{m}\delta\vec{k} = -\frac{e\mathbf{E}}{m}\tau$$

Velocidad de deriva (constante) de los electrones al aplicar un campo \mathbf{E} a un material con tiempo de relajación τ

Para relacionar estos parámetros con la conductividad de materiales, recordemos la ley de Ohm:

$$\vec{J} = nq\vec{v}_d = \sigma\vec{E} \quad \text{donde } n \text{ es la concentración de portadores (nº de electrones/volumen)}$$

Tema 3: Gas de Fermi de electrones libres

Gas de electrones libres en 3-D

Conducción eléctrica y ley de Ohm

Sustituimos ahora la velocidad de deriva en función del tiempo de relajación:

$$\vec{J} = nq\vec{v}_d = \frac{ne^2\tau}{m}\vec{E} = \sigma\vec{E}$$

Y quedan así relacionados el tiempo de relajación y la conductividad (y resistividad) del material

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m} \quad \Rightarrow \quad \rho = \frac{1}{\sigma} = \frac{m}{ne^2\tau}$$

Relación entre conductividad, concentración de portadores y tiempo de relajación de un conductor

- al aumentar la concentración de portadores, aumenta la conductividad
- al aumentar el tiempo de relajación, también aumenta la conductividad

Otro parámetro de gran importancia en conductores es la movilidad, μ , de portadores de carga

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

$$\sigma = ne\mu$$

Tema 3: Gas de Fermi de electrones libres

Gas de electrones libres en 3-D

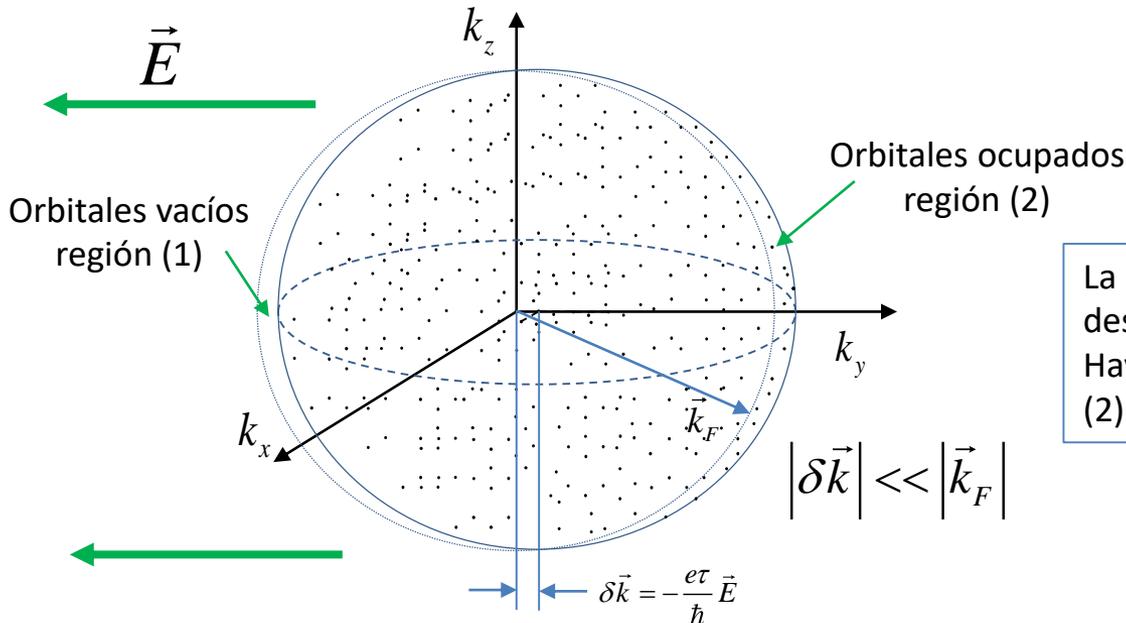
Conducción eléctrica y ley de Ohm

¿Qué distancia recorren los electrones en promedio, entre colisión y colisión?

Recorrido libre medio: $l = v_F \tau$

¿por qué lo calculamos considerando la velocidad de Fermi?

El desplazamiento de la esfera de Fermi, δk , es mucho menor que su radio, k_F .



La conducción eléctrica se debe al desplazamiento neto de la esfera de Fermi. Hay que considerar los electrones en la región (2). Su velocidad es v_F (su momento es k_F)

Tema 3: Gas de Fermi de electrones libres

Gas de electrones libres en 3-D

Conducción eléctrica y ley de Ohm

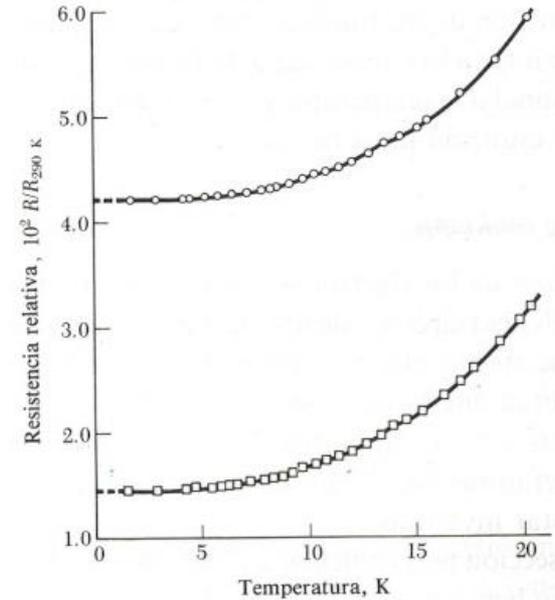
Ya se ha mencionado que el tiempo de relajación tiene dos contribuciones:

- defectos: impurezas, vacantes, intersticiales, dislocaciones,...
- vibraciones de la red (*fonones*, Física Estado Sólido II)

Se puede escribir:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_i} + \frac{1}{\tau_r} \quad \Rightarrow \quad \rho = \rho_i + \rho_r$$

- τ es el tiempo de relajación total
- τ_i debido a colisiones con imperfecciones
- τ_r por colisiones con vibraciones de la red, *fonones*



Regla de Matthiessen:

con frecuencia τ_i (y ρ_i) es independiente de la temperatura y τ_r (y ρ_r) independiente del nº de imperfecciones

Tema 3: Gas de Fermi de electrones libres

Gas de electrones libres en 3-D

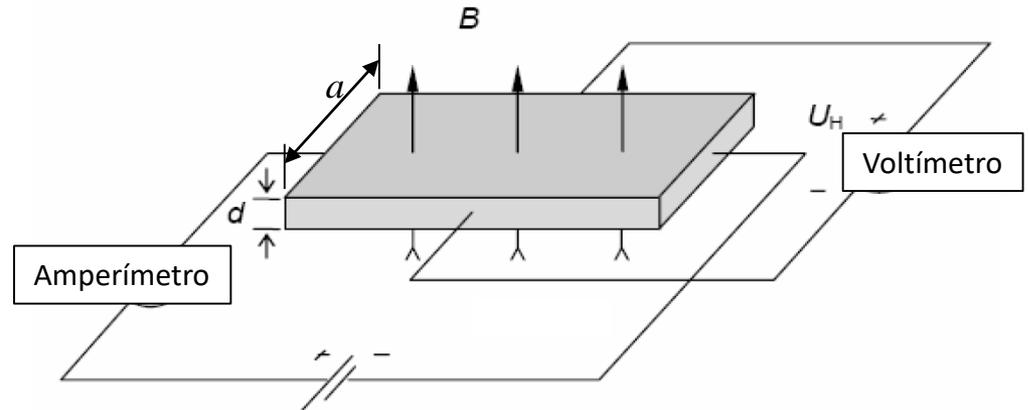
Efecto Hall

Uno de los métodos más extendidos para caracterizar las propiedades de conducción (densidad de portadores, signo de los portadores) de un conductor es el **Efecto Hall**:

Se hace pasar una corriente I por un conductor de sección rectangular conocida que está en presencia de un campo magnético \vec{B} perpendicular a su base. Entre sus caras laterales aparece una diferencia de potencial U_H voltaje Hall.

$$U_H = \pm \frac{1}{n \cdot e} \frac{I \cdot B}{d} = R_H \frac{I \cdot B}{d}$$

R_H es el **coeficiente Hall** y nos permite conocer **la concentración** y **el signo de los portadores de carga**



Con esta misma técnica, con otros valores fácilmente medibles, se puede obtener también otro parámetro fundamental: la movilidad de portadores.