TEORÍA DE DRUDE

· Consideramos que los Z electrones de valencia forman un gas ideal. Es interesante definir r_s como el radio de una esfera igual al volumen por e^-:

$$r_s = \left(\frac{3}{4\pi n}\right)^{1/3} \qquad \left(\frac{4}{3}\pi r_s^3 = \frac{1}{n}\right)$$

$$(r_s \sim 2a_0)$$

· Los postulados básicos son:

1. Despreciamos la interacción $e^- - e^-$ y e^--ión

2. Asumimos que las colisiones necesarias para termalizar ocurren con los iones (esto nos permite, DESPUÉS de cada choque, seguir la pista a un solo e^- en vez de estudiar las interacciones de muchos)

3. Condensamos toda la dinámica en lo siguiente: obviamos el modelo de colisiones y asumimos que la probabilidad de colisionar en un intervalo infinitesimal dt es $dP = \frac{1}{\tau}dt \Leftrightarrow$ la probabilidad de colisión por unidad de tiempo es $\frac{1}{\tau}$.

   Como se verá en problemas, esto implica que τ es: (ver los problemas)

   · El tiempo hasta la siguiente colisión en promedio.

   · El tiempo desde la última colisión en promedio.

   · El tiempo entre colisiones en promedio. (para un e^- que acaba de colisionar, el tiempo hasta la siguiente colisión sigue siendo τ)

4. Después de cada colisión, los e^- emergen con una velocidad termalizada y, por tanto, aleatoria según la distribución de Maxwell-Boltzmann: pierden la memoria.

CONDUCTIVIDAD ELÉCTRICA: CC

. Macroscópicamente, se define:

$$\vec{J} = -ne\langle\vec{v}\rangle$$

con $\langle\vec{v}\rangle$ un promedio estadístico sobre todos los e^-: $\langle\vec{v}\rangle = \frac{\sum_{i=1}^{N}\vec{v}_i}{N}$

. Consideremos un e^- en $t=0$. Si ha pasado un tiempo t desde el último choque y hay $\vec{E}$ cte. y uniforme:

$$\vec{v} = \underbrace{\vec{v}_0}_{\text{velocidad térmica}} - \underbrace{\frac{e\vec{E}}{m}}_{\vec{a}}\, t$$

así, $\langle\vec{v}\rangle = \overbrace{\cancel{\langle\vec{v}_0\rangle}}^{0 \text{ por ser M-B isótropo}} - \underbrace{\left\langle\frac{e\vec{E}}{m}t\right\rangle}_{\frac{e\vec{E}}{m}\text{ común a todos los } e^-} = -\frac{e\vec{E}}{m}\langle t\rangle = -\frac{e\vec{E}}{m}\tau$, por ser τ el tiempo promedio desde el último choque.

. Así, $\vec{J} = \frac{ne^2\tau}{m}\vec{E} = \sigma\vec{E} \Rightarrow \boxed{\sigma = \frac{ne^2\tau}{m}}$

. Esto permite estimar $\tau = \frac{\sigma m}{ne^2} \sim 10^{-14}\,s$. Así, el recorrido libre medio $v_0\tau$ se puede estimar suponiendo equipartición. El resultado es del orden de 1-10 Å, lo que es consistente con la hipótesis de colisión con iones.

Sin embargo, un cálculo más correcto da recorridos libres medios ~10^3 Å o incluso ~centímetros, lo que muestra que en realidad las colisiones no son con iones.

ECUACIÓN MAESTRA

· Sea $\langle \vec{p} \rangle$ el momento promedio (estadístico). Veamos qué ocurre tras un tiempo dt, tanto si un e^- choca como si no, para un e^- cualquiera sometido a una fuerza HOMOGÉNEA $\vec{f}(t)$:

t	$t+dt$	Probabilidad
$\vec{p}(t)$	$\vec{p}_{NC}(t+dt) = \vec{p}(t) + \vec{f}(t)\,dt + O(dt^2)$	$1-\frac{dt}{\tau}$
	$\vec{p}_C(t+dt) = \underbrace{\vec{p}_0}_{\text{Momento termalizado tras el choque}} + \vec{f}(t)\,\alpha\, dt + O(dt)$; término en $\vec{f}$; $\alpha \in [0,1]$ (fracción de dt transcurrida)	$\frac{dt}{\tau}$

por lo que
$$\langle \vec{p}(t+dt) \rangle = \left(1-\frac{dt}{\tau}\right)\langle \vec{p}_{NC}(t+dt)\rangle + \frac{dt}{\tau}\,\vec{p}_c(t+dt) =$$

$$= \langle \vec{p}(t) \rangle + \langle \vec{f}(t) \rangle\, dt - \frac{\langle \vec{p}(t) \rangle}{\tau} + O(dt^2) + \underbrace{\cancel{\langle \vec{p}_0 \rangle}}_{0 \text{ por termalizar}} \cdot \frac{dt}{\tau} +$$
$$+ O(dt^2)$$

así,
$$\frac{\langle \vec{p}(t+dt) \rangle - \langle \vec{p}(t) \rangle}{dt} = \boxed{\frac{d\langle \vec{p} \rangle}{dt} = -\frac{\langle \vec{p}(t) \rangle}{\tau} + \vec{f}(t)}$$
(es como escribir $\vec{p} \equiv \langle \vec{p} \rangle$)

$\langle \vec{f} \rangle = \vec{f}$ por ser $\vec{f}$ homogénea

Vemos un término $-\frac{\langle \vec{p}(t) \rangle}{\tau}$ que causa equilibrio: las colisiones termalizan.

· Si $\vec{f}$ no fuera homogénea, habría que entrar en digresiones estadísticas y la cosa se complicaría.

· La ecuación es estadística, no nos dice qué le pasa a un e^- concreto.

EFECTO HALL Y MAGNETORESISTENCIA

· Hall supuso, ingenuamente, que la resistencia de un cable variaría al aplicar un campo magnético transversal (habría rozamiento, más choques.. por ser desplazados los e^-). Así, esta aplicación permitiría al fin discernir si:

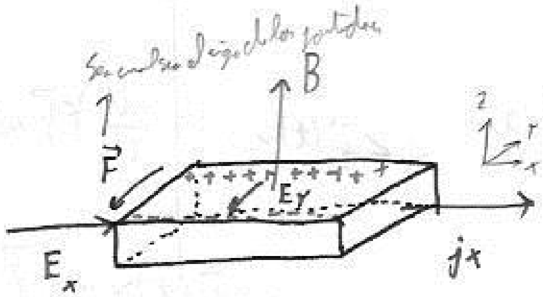
- La fuerza es sobre el cable o sobre los portadores
- Como veremos, el signo de la carga de los portadores

· Para cuantificar este efecto, definimos:

- Magnetoresistencia $\boxed{\rho(B) \equiv \frac{E_x}{j_x}}$
- Coeficiente Hall $\boxed{R_H \equiv \frac{E_y}{j_x B}}$

(por aquello de que al ser la fuerza proporcional a j_x y a B, E_y será proporcional a estos)

$\propto j_x \Leftrightarrow v_x$



↓ Si el signo de los portadores es positivo, E_y es opuesto y R_H negativo

· Su tratamiento según Drude es fácil. Ecuación vectorial:

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = -e\left(\vec{E} + \frac{\vec{p}}{m} \times \vec{B}\right) - \frac{\vec{p}}{\tau}$$

en estado estacionario:

$$\begin{cases} 0 = -eE_x - \omega_c p_y - \frac{p_x}{\tau} \\ 0 = -eE_y + \omega_c p_x - \frac{p_y}{\tau} \end{cases} \quad \text{con } \omega_c \equiv \frac{eB}{m}$$

· Multiplicando por $-\frac{ne\tau}{m}$ podemos relacionar $\vec{p}$ con $\vec{j}$: $\left(\vec{j} = -\frac{ne\vec{p}}{m}\right)$

$\omega_c \tau$ varía con la intensidad de B ⟸

$$\sigma_0 E_x = \omega_c \tau j_y + j_x$$
$$\sigma_0 E_y = -\omega_c \tau j_x + j_y$$

con $\sigma_0 = \frac{ne^2\tau}{m}$, la conductividad de Drude

· Exigiendo que no haya corriente transversal (estado estacionario), $j_y = 0$:

$$E_y = -\frac{\omega_c \tau}{\sigma_0} j_x = -\left(\frac{B}{ne}\right) j_x$$

así, obtenemos la siguiente <u>predicción</u> para R_H:

$$R_H = -\frac{1}{ne} \Rightarrow \text{no depende de } \tau \text{!!!}$$

↳ permite calcular a priori su valor

· Esto permite derivar $n \equiv n_{Hall}$ y compararlo con la densidad de electrones de valencia n_{teo}

· Aunque por lo general matchea relativamente bien, existen discrepancias y, lo que es peor:

· Hay materiales con $R_H > 0$ (!!!)

· Depende de la temperatura ← notable a T<<<

· Depende de B ← notable a B>>>

· Depende de la pureza ← notable a pureza>>>

Raro pq. τ, que podría depender de estas cosas, no aparece en R_H

· Además, si $j_y = 0$, $\rho = \rho_0$, pero experimentalmente vemos que ρ depende de B.

CONDUCTIVIDAD AC

· Consideramos la respuesta del metal sometido a un campo $\vec{E} = \vec{E}(\omega)\, e^{-i\omega t}$

Cuando tenemos $\vec{E} = \vec{E}(t)$, recurrimos a una descomposición de Fourier

· Aunque estos campos dependen de la posición y, por tanto, la ecuación nuestra no es estrictamente aplicable, en su deducción hemos hecho $\langle \vec{p} \rangle = \vec{p}$. Esto puede considerarse un promedio en un cierto entorno de cada punto $\vec{r}$, y será válido siempre que en el tiempo en el que el e^- es afectado por el campo (recorrido libre medio) éste apenas varíe $\Rightarrow \lambda$ altas comparadas con el recorrido libre medio.

· Asimismo, habría que introducir un $\vec{B}$, pero como $B = \frac{1}{c} E$ y $\frac{v}{c} \sim 10^{-10}$, su efecto es despreciable.

consideramos la velocidad de arrastre, que es lo que va a contar

$$\cdot \quad \frac{d\vec{p}}{dt} = -\frac{\vec{p}}{\tau} - e\vec{E}\, e^{-i\omega t}$$

una EDO lineal. Buscamos una solución particular (la homogénea cae exponencialmente en un tiempo $\sim\tau$).

$$\vec{p} = \vec{p}(\omega)\, e^{-i\omega t} \Rightarrow \not{-} i\omega\, \vec{p}(\omega) = \not{-} \frac{\vec{p}(\omega)}{\tau} \not{-} e\vec{E}(\omega)$$

$$\Downarrow$$

$$\vec{p}(\omega) = \frac{e\, \vec{E}(\omega)}{i\omega - \frac{1}{\tau}}$$

$$\Downarrow$$

$$\vec{j}(\omega) = \frac{(ne^2/m)\, \vec{E}(\omega)}{1/\tau - i\omega}$$

· Es decir:

conductividad CC (cuando si $\omega = 0$)

$$\boxed{\vec{j}(\omega) = \sigma(\omega)\, \vec{E}(\omega) \quad ; \text{ con } \sigma(\omega) = \frac{\sigma_0}{1 - i\omega\tau}}$$

· Como $\tau \sim 10^{-14}$ s, la componente AC apenas influye en frecuencias electrónicas ($\sim$ GHz), pero sí en frecuencias ópticas.

· A frecuencias electrónicas hay otros efectos más importantes, como el efecto skin: la corriente tiende a ir a la superficie, disminuyendo la sección y aumentando R.

· Si $\vec{E}$ no fuera sinusoidal, habría que jugar con Fourier:

Conocer: $\vec{E}(t) = \int d\omega\, \vec{E}(\omega) e^{-i\omega t}$

$$\vec{E}(t) \xrightarrow[\mathcal{F}]{} \vec{E}(\omega) \longrightarrow \vec{j}(\omega) = \sigma(\omega)\vec{E}(\omega) \xrightarrow[\mathcal{F}^{-1}]{} \vec{j}(t)$$

· Pero por el teorema de la convolución:

$$\boxed{\vec{j}(t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \sigma(t-t')\vec{E}(t')\,dt'}$$

→ La corriente ahora depende de $\vec{E}$ en el futuro ⇒ ¡se viola causalidad!

ahora bien, $$\sigma(t) = \int_{-\infty}^{\infty}\sigma(\omega)e^{-i\omega t}d\omega \underset{\text{Ejercicio}}{=} \begin{cases} \frac{2\pi\sigma_0}{\tau}e^{-t/\tau} & \text{si } t>0 \\ 0 & \text{si } t<0 \end{cases}$$

así:

$$\boxed{\vec{j}(t) = \frac{\sigma_0}{\tau}\int_{-\infty}^{t} \underbrace{e^{-\frac{t-t'}{\tau}}}_{}\vec{E}(t')\,dt'}$$

→ Esto ya no viola causalidad

En realidad, sólo importa el valor de $\vec{E}$ en un tiempo $\sim\tau$ en el pasado, que es justamente el tiempo transcurrido desde la última colisión

OJO: Nunca escribir $v^2 \sim V$ hasta que se haga la geometría
a 3D es $v^2 \longrightarrow \frac{1}{3} v^2$

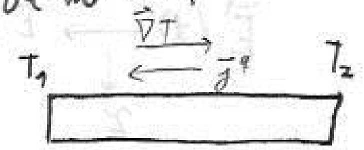
CONDUCTIVIDAD TÉRMICA

(concepto en fenómeno de transporte, los conceptos entre nosotros)

· Fue el mayor éxito del modelo de Drude.

· Asumimos que el calor es transferido por los e^- (pues los aislantes son muy malos conductores térmicos). Nuestro objetivo es explicar la ley de Fourier:

$$\vec{j}^{\,q} = -\chi \vec{\nabla} T$$



$(T_1 < T_2)$

Nótese la analogía con el caso eléctrico

↳ Calor por unidad de tiempo y unidad de superficie

· Consideremos una superficie que separa dos regiones a temperaturas diferentes:

$T_1 > T_2$

aunque las velocidades de los e^- a uno y otro lado son las mismas (véase efecto termoeléctrico) y no existe flujo neto de e^-, los e^- de la derecha tienen más energía térmica, por lo que existe un flujo neto de energía: $E = E(T) = E(T(x))$. → Posición de la última colisión, que al final es lo que tenemos

· Los e^- de la derecha tendrán energía $E(T(x + \underbrace{v\tau}_{\text{Recorrido libre medio}}))$. Como se mueven hacia x negativas y en promedio hay $\frac{n}{2}$ por unidad de volumen cercanos a la superficie, su contribución al flujo es:

$$-\frac{n}{2} v\, E(T(x + v\tau))$$

· En lo que respecta a los e^- de la izquierda:

$$\frac{n}{2} v\, E(T(x - v\tau))$$

así,

$$j^q = \frac{1}{2} n v \left[E(T(x - v\tau)) - E(T(x + v\tau)) \right]$$

para distancias infinitesimales: (válido si el recorrido libre medio y T apenas varían, lo cual ocurre por ser el primero microscópico y el segundo macroscópico)

$$j^q = n v^2 \tau \frac{dE}{dT} \cdot \left(-\frac{dT}{dx} \right)$$

Deducción: $j^q = -\frac{1}{2} n v \underbrace{\left[E(T(x + dx)) - E(T(x - dx)) \right]}_{2dE = 2\frac{dE}{dx}dx = 2\frac{dE}{dT}\frac{dT}{dx}\cdot dx}$, $dx = v\tau$

· Pasando a 3D, v^2 se sustituiría por $\langle v_x^2\rangle = \frac{1}{3}\langle v^2\rangle \equiv \frac{1}{3}v^2$. Así, escribiendo todo en notación vectorial:

$$\boxed{\vec{j}^{\,q} = \frac{1}{3} v^2 \tau c_v (-\vec{\nabla} T)}$$

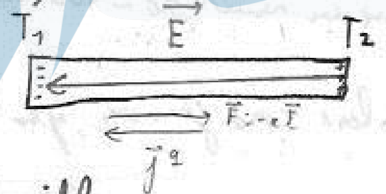
donde se ha aplicado $c_v \frac{dE}{dT} \equiv \frac{N}{V}\frac{dE}{dT} \underset{U=NE}{=} \frac{1}{V}\frac{dU}{dT} = c_v$

· Es decir, $\underline{\kappa = \frac{1}{3} v^2 \tau c_v}$

· Así, $\underline{\frac{\kappa}{\sigma} \overset{\text{Aplicar equipartición}}{=} \frac{3}{2}\left(\frac{k_B}{e}\right)^2 T}$ $\Rightarrow$ Ley de Wiedemann-Franz. Drude consiguió explicar esta ley experimental. Tanto que los coeficientes (coeficiente de Lorenz) calculados eran del orden de la mitad del valor experimental, Drude cometió un error de cálculo que le hizo introducir un factor 2
(en realidad hay dos factores de 100 [illegible])

EFECTO TERMOELÉCTRICO O SEEBECK

· La idea es que como los e^- del extremo caliente tienen más velocidad, va a existir cierta corriente eléctrica neta. Así, en estado estacionario:



$T_1 < T_2$

· El tratamiento es bastante sencillo:

· La velocidad media debida al gradiente de temperatura vale:

$$v_Q = \frac{1}{2}\left[v(x - v\tau) - v(x + v\tau)\right] \underset{\text{de antes}}{=} -\tau v \frac{dv}{dx} =$$

$$= -\tau \frac{d}{dx}\left(\frac{v^2}{2}\right) = -\frac{\tau}{2}\frac{dv^2}{dT}\frac{dT}{dx}$$

O, en 3D, $v^2 \to v_x^2 = \frac{1}{3}v^2$:

$$\vec{v}_Q = -\frac{\tau}{6}\frac{dv^2}{dT}\vec{\nabla} T$$

· La velocidad media debida al campo eléctrico vale: (véase conductividad EC)

$$\vec{v}_E = -\frac{e\vec{E}\tau}{m}$$

· Equilibrio, ambas serán iguales y de sentido contrario ($\vec{v}_E + \vec{v}_q = 0$):

$$-\frac{\tau}{6}\frac{dv^2}{dT}\vec{\nabla}T - \frac{e\vec{E}\tau}{m} = 0$$

$$\vec{E} = -\frac{1}{6}\frac{m}{e}\frac{dv^2}{dT}\vec{\nabla}T$$

$$\Downarrow$$

$$\boxed{\vec{E} = Q\vec{\nabla}T}$$ (efecto Seebeck)

con $Q = -\frac{1}{3e}\frac{d}{dT}\frac{mv^2}{2} = -\frac{1}{3e}\frac{du}{dT} = -\frac{1}{3e}\frac{\overbrace{c_v}^{C_v/V}}{n} \Big\} \frac{C_v}{N}$

$$Q = -\frac{c_v}{3ne} \overset{\text{equip.}}{=} -\frac{k_B}{2e}$$

· Si suponemos equipartición, se obtiene un resultado ~100 veces mayor que el experimental!!!

· El problema es que hay que describir a los e^- como fermiones, y en la ley de Fourier había dos factores de 100 que de casualidad se compensaban (en $\overset{\text{100 veces menor que la real}}{v^2}$ y $\underset{\text{100 veces mayor que la real}}{c_v}$)

· De todas formas, la aparición de $\vec{E}$ justifica haber tomado las velocidades a izquierda y derecha iguales en Fourier, pues este campo eléctrico compensa esa velocidad extra. Con $\vec{E}$ nulo, T^+, se para [illegible] más rápido. Esto no afecta al transporte neto de energía, pues la velocidad inducida por $\vec{E}$ y la térmica son de dos órdenes de magnitud radicalmente diferentes.

· Aun así, todo este modelo es muy burdo, pues rigurosamente habría que haber empleado teoría de transporte.