

MODELO DE SOMMERFELD

La idea es muy sencilla: en el modelo de Drude, al final de una serie de derivaciones se ha aplicado la estadística de Maxwell-Boltzmann. Sin embargo, la estadística correcta para describir a los fermiones es la de Fermi-Dirac.

INCISO: DISTRIBUCIONES CUÁNTICAS PARA PARTÍCULAS INDEPENDIENTES

↑  
 anti o no sonadas, o potencial  
 sin o no solido

Si  $\mu < 0$ , solo la distribución de Planck, válida para fotones y fonones

$$f_i = \frac{1}{e^{(E_i - \mu)/k_B T} + 1}$$

$\sum_{i=0}^{T=0} 1$   
 $\hookrightarrow B-E$  (Aunque usualmente los niveles pueden estar muy poblados)  $\approx B-E$

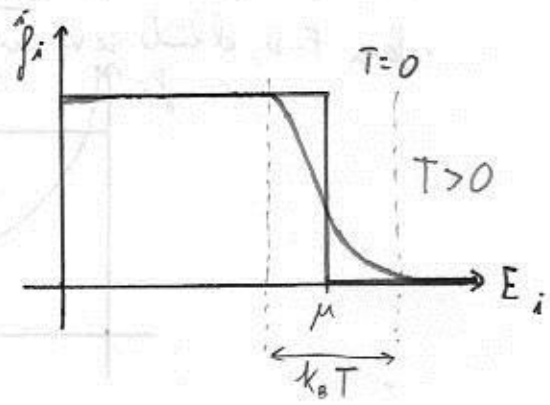
- $i$  es el estado de una partícula (con spin)
- $f_i$  NO es en general una probabilidad, sino el número medio de partículas en el estado  $i$ :  $f_i = \langle n_i \rangle$
- $\mu$  es el potencial químico:  $\mu = \mu(N, T)$ . Se puede entender o bien como una especie de origen de energía, o bien como un multiplicador de Lagrange que se halla imponiendo  $\sum \langle n_i \rangle = N$

Nos centramos en Fermi-Dirac.

Si  $T \rightarrow 0$ , se reduce a

$$\begin{cases} 0 & \text{si } E_i > \mu \\ 1 & \text{si } E_i < \mu \end{cases}$$

↓  
 el estado fundamental del sistema se halla llenando todas las órbitas de abajo arriba



Si  $T > 0$  pero pequeño, lo diferencial es apreciable solamente si  $E_i - \mu \sim k_B T$ .

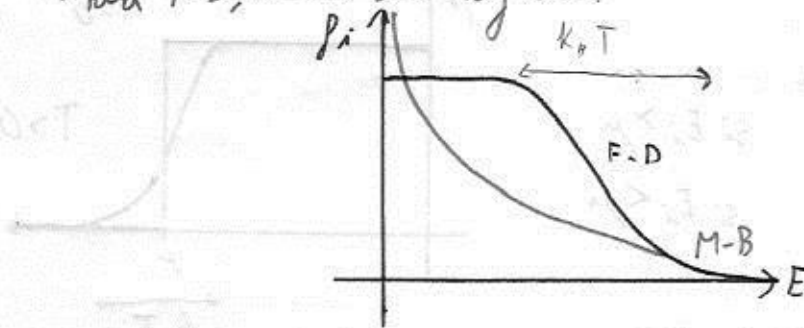
Denominaremos energía de Fermi  $E_F = \lim_{T \rightarrow 0} \mu(T)$  (vease que para metales y microconductores a temperaturas ambiente es  $\mu$ )

Unas palabras sobre el límite clásico:

- Demuestramos si el 1 es despreciable, en cuyo caso vuelvo a Boltzmann:  $e^{\mu/k_B T} e^{-E_i/k_B T}$   
 $\approx \lambda e^{-E_i/k_B T}$  ( $\lambda$ , igual que  $\mu$ , solo ignorado  $\sum f_i = N$ )
- Así, quiero que  $e^{\frac{E_i - \mu}{k_B T}} \gg 1 \forall i \Leftrightarrow f_i \ll 1 \forall i$

- Es decir, hay que pedir que haya poco solapamiento entre las funciones de onda para no tener que considerar el carácter bosónico/fermiónico.
- Y es que la diferencia es que en mecánica clásica las partículas son distinguibles y las cuentas estadísticas se hacen considerando estas; mientras que en mecánica cuántica son indistinguibles y las cuentas consideran estados. Al llevarlos, hay que tener en cuenta Pauli y todo cambia, pero si hay muy poca ocupación esto no importa.
- Yendo más a la raíz, en mecánica clásica puedo seguir trayectorias  $\vec{r}(t)$ . En mecánica cuántica estas trayectorias son un poco gordas. Si hay solapamiento, no puedo decir trayectorias  $\Rightarrow$  el carácter cuántico o (límite) clásico depende de la densidad.

• Para F-D, el límite se ve muy bien:



Para llegar a M-B, tengo que hacer F-D muy fofa  $\Rightarrow k_B T \sim E_F \sim 10^4$  K a retales  
 $\downarrow$   
 Así lo fofa llegará al límite clásico  
 lo es demerito está en región donde hay pocas partículas

a  $T=0$  al gas electrónico se le denomina gas degenerado.

(a nivel,  $E_F \sim 10$  eV y  $k_B T \sim \frac{1}{40}$  eV, así que para el caso es como si estuvieran ahí)

- Nótese que la estadística de Planck no tiene límite clásico: deberían tener  $e^{\frac{E_i}{k_B T}} \gg 1 \forall i$ . Pero  $E = c p = c h k$  y como a priori  $k$  puede ser arbitrariamente pequeño, a cualquier temperatura siempre existe una región de energía con ocupación alta.

# APLICACIÓN AL GAS DE ELECTRONES LIBRES

- Esperamos por calcular los niveles de energía. Para ello, hay que resolver la ecuación de Schrödinger con ciertos C.C.

- Ahora bien, si no nos interesan los efectos de superficies sino lo que ocurre dentro del sólido, los C.C. no importan.

- Por esa razón, en lugar de aplicar C.C. homogéneas (las lógicas), aplicamos un artificio matemático: C.C. periódicas: (la red imita a la estructura periódica de la fratura)

- Para empezar, los autoestados de las C.C. periódicas (ondas planas) son mucho más sencillos que los de las C.C. homogéneas (ondas estacionarias) y aparte según el tiempo

$$\begin{cases} \psi(x, y, z+L) = \psi(x, y, z) \\ \psi(x, y, z) = \psi(x, y, z) \\ \psi(x+L, y, z) = \psi(x, y, z) \end{cases}$$

- Por otra parte, con C.C. periódicas, todas las partes son equivalentes  $\Rightarrow$   $\Rightarrow$  conseguimos un sistema  finito y sin fronteras (no habrá efectos de superficie)

- Todo se podría hacer con C.C. homogéneas, pero como la fratura no afecta a lo que ocurre en el interior de un sólido entonces los resultados finales para el interior (lo que nos interesa) serán los mismos.

La solución a la ecuación de Schrödinger para los  $e^-$  libres, es trivial: (podemos ignorar el sólido por completo, solo el espacio, solo la fratura)

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

$$E_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

con  $k_x = \frac{2\pi n_x}{L}$ ;  $k_y = \frac{2\pi n_y}{L}$ ;  $k_z = \frac{2\pi n_z}{L}$

$n_x, n_y, n_z$  enteros

- A partir de esto, es fácil hallar el número de estados con  $k < k_0$ : (el dibujo de todo el modo de puntos en el espacio de las  $k$ )

$$\neq \frac{\frac{4}{3} \pi k_0^3}{8 \pi^3} \rightarrow$$

¡OJO!  $\Rightarrow$  SPIN

debido a las C.C., no nos preocupamos por los efectos de la superficie, pero el valor es importante

o el número de estados con  $k_x, k_y, k_z < dk$

$$dN = \frac{V}{\pi^2} k^2 dk$$

• Esto nos permite hallar la distribución de velocidades sin más que multiplicar el número de estados con velocidad entre  $\vec{v}$  y  $\vec{v} + d\vec{v}$  por la población de dichos estados:

Hoy que estado de velocidad de este tipo (a no degen.)

$$f(\vec{v}) d^3\vec{v} = \frac{(m/h)^3}{4\pi^3} \frac{1}{e^{\frac{1}{k_B T} (\frac{1}{2} m v^2 - \mu)} + 1} d^3\vec{v}$$

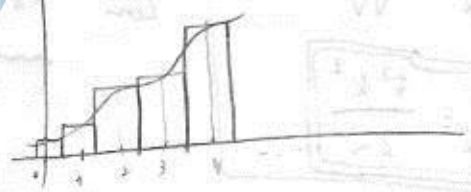
INCISO: CÁLCULO DE SUMAS

• En este tema será muy común encontrar  $\sum_{\vec{n}} F(\vec{n})$ , que pueden estar intentados a calcular, por comodidad, sumando sobre energías, vectores de onda...

• Para eso, en lugar de hacer los cálculos geométricos del # de estados, es más cómodo lo siguiente:

$$\sum_{\vec{n}} F(\vec{n}) = \sum_{n_x, n_y, n_z} F(n_x, n_y, n_z) \sim \int_{Rg(n_x, n_y, n_z)} F(n_x, n_y, n_z) dn_x dn_y dn_z$$

donde el último paso es válido si sumo sobre una gran cantidad de  $\vec{n}$ . La justificación se ve mejor en 1D y es inmediata:



Como la anchura de los intervalos es 1 (uno solo  $\Delta$ ), la masa, el área del histograma, que para valores grandes con el área bajo la curva (lo integral)

Así, una vez en la integral, se pueden hacer cambios de variables y los Jacobianos no danán el número de estados entre  $x$  y  $x+dx$ .

DENSIDAD DE ESTADOS

• Esto último nos trata a definir la densidad de estados  $g(E)$  como aquella función que cumple que el número de estados  $d\#$  con energía entre  $E$  y  $E+dE$  vale:

$$d\# = V g(E) dE \quad (\text{lo calcula dando jacobiano})$$

Es una densidad de estados en el espacio de energías por unidad de volumen.

↳ no de partículas

↳ cantidad dividida entre  $V$  (normalización)

NO como en teoría de sólidos y entre estados  
esto es entre estados por estar los  $e^-$  deslocalizados

En definición es útil por dos razones: por un lado, cuando hablamos de teoría de bandas, nos dará una idea de la degeneración. Por otro lado, simplifica mucho los integrales:

$$n = \int g(E) f(E) dE$$

↳ de estados

↳ de estados

$\frac{\text{degeneración}}{V}$

$$\frac{E}{V} = \int g(E) f(E) dE$$

En un sólido tridimensional,  $g(E) \sim \sqrt{\frac{E}{E_F}}$  ( $\propto \frac{n}{E_F} \sqrt{\frac{E}{E_F}}$ )

## PROPIEDADES EN EL CERO ABSOLUTO

Por solo estar ocupado el estado fundamental. Así, estarán ocupados todos los estados con vector de onda  $k < k_F$ , siendo  $k_F$  tq.: la esfera rodeada por  $k_F$  se le denomina superficie de Fermi

$$2 \cdot \frac{4}{3} \pi k_F^3 \cdot \frac{1}{(2\pi)^3} = N$$

(nº estados ocupados = N)

↳  $\frac{4}{3} \pi k_F^3$  Volumen de la esfera

↳  $\frac{1}{(2\pi)^3}$  Volumen de cada nivel

$$n = \frac{k_F^3}{3\pi^2}$$

o, alternativamente,  $N = 2 \sum_{n < E_F} g_i \approx 2 \int_{n < E_F} d^3 n = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{k < k_F} d^3 k = \frac{2V}{(2\pi)^3} 4\pi \int_0^{k_F} k^2 dk = \dots$

Análogamente, estarán ocupados aquellos

estados con  $E < E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$ .  $E_F$  se calcula igual.

En estas condiciones,  $U = \int g(E) E f(E) dE$  resulta ser:

$$U = \frac{3}{5} N E_F \Rightarrow E \sim E_F \Rightarrow E \sim V^{-2/3} \quad (\text{a N de.})$$

Asimismo, a cualquier temperatura,  $P = \frac{2}{3} \frac{U}{V}$  (convergencia)

Es muy importante conocer órdenes de magnitud:

$$E_F \sim 10 \text{ eV} \Rightarrow T_F \equiv \frac{E_F}{k_B} \sim 10^4 \text{ K} \Rightarrow AT \text{ está, } k_B T \ll E_F, \text{ y la distribución de Fermi-Dirac es prácticamente la de } T=0 \text{ K}$$

$\Rightarrow$  Si los  $e^-$  permanecen quietos, habrá que estar a  $T \sim 10^4 \text{ K}$   
 $\Rightarrow$  por eso desde retina a un  $\mu\text{s}$  de 100

$$k_F \sim 1 \text{ \AA}^{-1} \Rightarrow \lambda_{\text{De Broglie}} \sim \text{Å}$$

$$v_F \equiv \frac{\hbar}{m} k_F \sim 10^6 \text{ m/s}$$

$\Rightarrow$  Demasiado, la energía es mucho mayor que para un quieto

$\Rightarrow$  Esto explica la incompresibilidad de los metales

# Zimatek

$T > 0 \text{ K}$

El cambio es par de:

$$\int_{-\infty}^{E_F} H(E) f(E) dE \rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} H(E) f(E) dE$$

$\cdot n \Rightarrow H(E) = g(E)$

$U \Rightarrow H(E) = E g(E)$

Aquí se suele hacer un desarrollo a serie alrededor de  $E = \mu$  (desarrollo de Sommerfeld):

$$\int_{-\infty}^{\infty} H(E) f(E) dE \sim \int_{-\infty}^{\mu} H(E) f(E) dE + \sum_{n=1}^{\infty} (k_B T)^{2n} \frac{d^{2n-1}}{dE^{2n-1}} H(E) \Big|_{E=\mu}$$

es decir, la influencia de la temperatura:

$\cdot$  Es pequeña

Depende de lo que valga  $H$  en  $E = \mu \Rightarrow$  lo que pase en el nivel de Fermi es importante

• Esto lleva a:

$$\mu = E_F \left[ 1 - \frac{\pi^2}{12} \left( \frac{T}{T_F} \right)^2 + \dots \right]$$

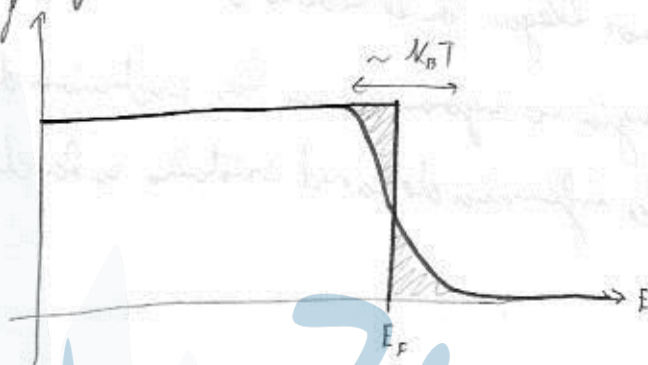
⇒ Tanto en caso de la temperatura ambiente difiere en  $\sim 1\%$  de sus valores a  $T=0K$

$$n = n_0 + \frac{\pi^2}{6} \frac{3}{2} n \cdot k_B T \cdot \left( \frac{T}{T_F} \right)^2 + \dots$$

⇓

$$c_v = \frac{\pi^2}{2} n k_B \frac{T}{T_F} \Rightarrow c_v \sim 1\% \text{ del resultado clásico}$$

• Este comportamiento lineal a bajas temperaturas se entiende muy bien:



• La diferencia de área entre  $T=0$  y  $T \neq 0$  es  $\sim k_B T$  por cada  $e^-$  movido

• La cantidad de  $e^-$  movidos son  $\sim \frac{k_B T}{\Delta E} g(E_F)$  (por cada  $e^-$  movido)

$$\Delta n \sim (k_B T)^2 g(E_F) \Rightarrow c_v \propto T \quad (\text{debido solo a } g(E_F) \propto T^3 \text{ en factor } \frac{\pi^2}{6})$$

• Y es muy útil porque experimentalmente se separa muy bien del iónico a bajas temperaturas ( $\propto T^3$ ).

Es, even, muchísimo más pequeño que este.

## DIFERENCIAS CON EL MODELO DE DRUDE

• Tan solo se diferencia en aquellas cantidades para las que Drude empleó la distribución de velocidades de Maxwell-Boltzmann: ( $\sigma$  y efecto Hall quedan igual)

• Recorrido libre medio:  $\tau v_F \rightarrow d_{el} \sim 100 \text{ \AA} \Rightarrow$  ¿i cómo se movían estas colisionando los electrones!?

• Conductividad térmica  $\chi = \frac{1}{3} v^2 \tau c_v \rightarrow$  la de la ley de Wiedemann-Franz, además de estar bien calculada, tiene un factor 2 que ajusta todos los datos experimentales

• Poder termoeléctrico  $Q = -\frac{c_v}{3ne} \rightarrow$  de del orde

• Y hasta aquí podemos llegar con el modelo de electrones libres. Correcciones como que  $\tau$  dependa de la energía no mejoran apenas las predicciones del modelo. Aventurémonos, pues, a estudiar la influencia de la red cristalina en la dinámica electrónica.

The logo for Zimatek features a stylized blue waveform on the left, consisting of several sharp, upward-pointing peaks. To the right of the waveform, the word "Zimatek" is written in a large, blue, cursive script font.