

Materia optativa de la licenciatura:

Temas de Física de la Materia Condensada (Sólidos)

Materia de doctorado:

Fenómenos Colectivos en Sólidos

Primer Cuatrimestre 2021:

Inicio de clases: lunes 22 de marzo

Fin de clases: sábado 10 de julio

Régimen de aprobación de las materias:

Participación en las clases de problemas

Examen parcial

Examen final

Adicional para la materia de doctorado:

Presentación de una charla hacia el final del cuatrimestre
(tema a elección)

Bibliografía

Solid State Physics, **Ashcroft and Mermin** (1976)

The Physics of Low-Dimensional Semiconductors, John **Davies** (1998)

Quantum Theory of the Optical and Electronic Properties of Semiconductors
Haug and Koch (2004)

Solid State Theory: An Introduction, **Rössler** (2009)

Many-Body Quantum Theory in Condensed Matter Physics,
Bruus and Flensberg (2004)

Programa de la materia

1. Teorías de Sommerfeld y Drude de los metales
2. Sistemas de baja dimensionalidad
3. Teoría de respuesta lineal
4. Gas de electrones con interacción Coulombiana
5. Excitones
6. Polaritones
7. Ondas de Espín: Magnones
8. Interacción Electrón-Fonón: pares de Cooper

Teoría de Sommerfeld de los metales

Periodic table of the elements

period	group 1*	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1	1 H																	2 He
2	3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
3	11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
4	19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
5	37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
6	55 Cs	56 Ba	57 La	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
7	87 Fr	88 Ra	89 Ac	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112 Cn	113 Nh	114 Fl	115 Mc	116 Lv	117 Ts	118 Og

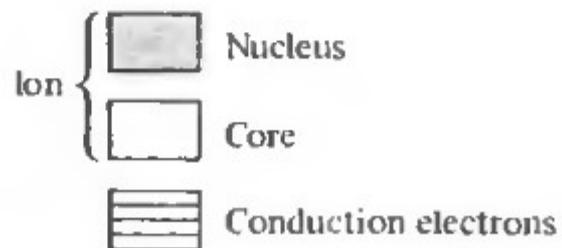
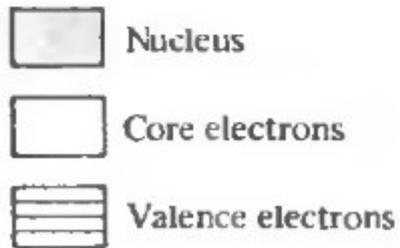
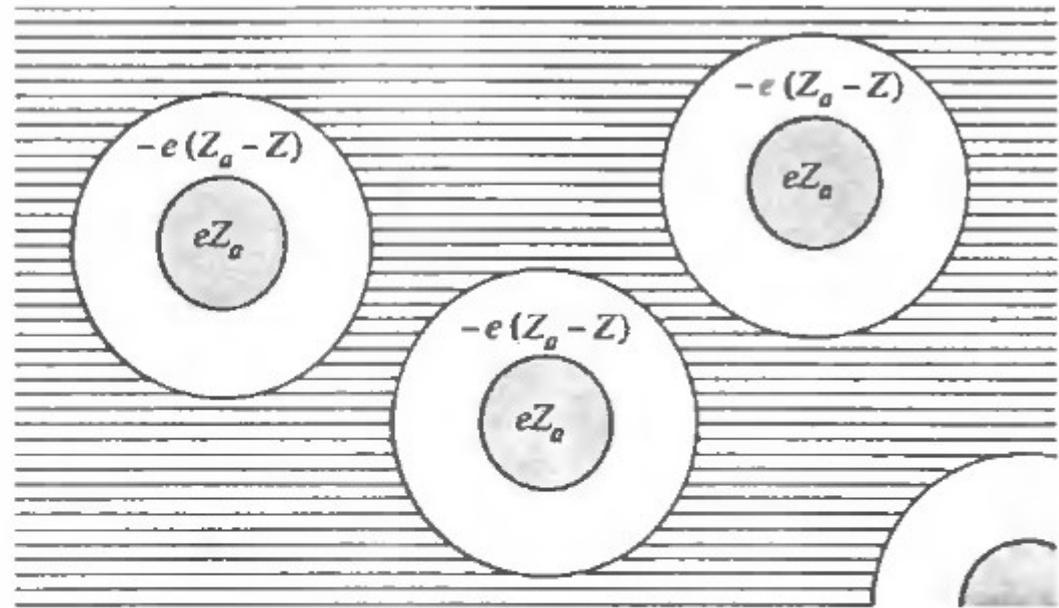
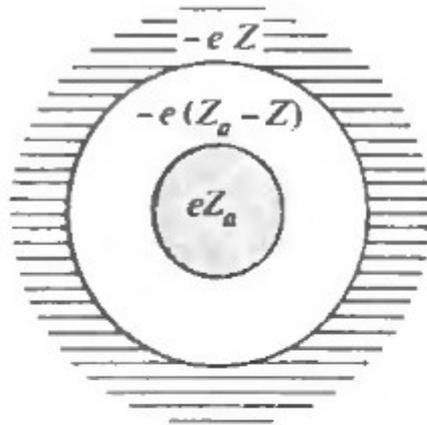
lanthanoid series 6	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu
actinoid series 7	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr

*Numbering system adopted by the International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC).

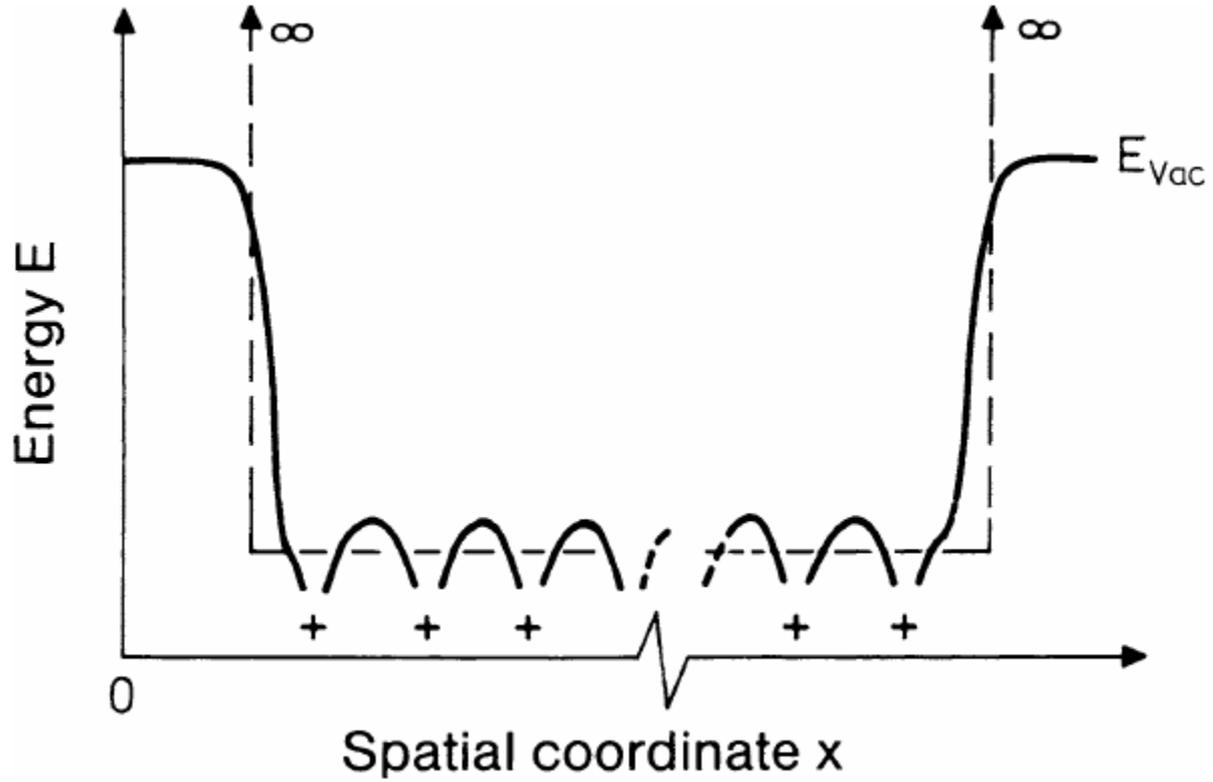
Teoría de Sommerfeld de los metales

1 H HEX																2 He HCP	
3 Li BCC	4 Be HCP											5 B RHO	6 C HEX	7 N HEX	8 O SC	9 F SC	10 Ne FCC
11 Na BCC	12 Mg HCP											13 Al FCC	14 Si DC	15 P ORTH	16 S ORTH	17 Cl ORTH	18 Ar FCC
19 K BCC	20 Ca FCC	21 Sc HCP	22 Ti HCP	23 V BCC	24 Cr BCC	25 Mn BCC	26 Fe BCC	27 Co HCP	28 Ni FCC	29 Cu FCC	30 Zn HCP	31 Ga ORTH	32 Ge DC	33 As RHO	34 Se HEX	35 Br ORTH	36 Kr FCC
37 Rb BCC	38 Sr FCC	39 Y HCP	40 Zr HCP	41 Nb BCC	42 Mo BCC	43 Tc HCP	44 Ru HCP	45 Rh FCC	46 Pd FCC	47 Ag FCC	48 Cd HCP	49 In TETR	50 Sn TETR	51 Sb RHO	52 Te HEX	53 I ORTH	54 Xe FCC
55 Cs BCC	56 Ba BCC	*	72 Hf HCP	73 Ta BCC	74 W BCC	75 Re HCP	76 Os HCP	77 Ir FCC	78 Pt FCC	79 Au FCC	80 Hg RHO	81 Tl HCP	82 Pb FCC	83 Bi RHO	84 Po RHO	85 At [FCC]	86 Rn FCC
87 Fr [BCC]	88 Ra BCC	**	104 Rf [HCP]	105 Db [BCC]	106 Sg [BCC]	107 Bh [HCP]	108 Hs [HCP]	109 Mt [FCC]	110 Ds [BCC]	111 Rg [BCC]	112 Cn [HCP]	113 Nh	114 Fl	115 Mc	116 Lv	117 Ts	118 Og
		*	57 La DHCP	58 Ce DHCP	59 Pr DHCP	60 Nd DHCP	61 Pm DHCP	62 Sm RHO	63 Eu BCC	64 Gd HCP	65 Tb HCP	66 Dy HCP	67 Ho HCP	68 Er HCP	69 Tm HCP	70 Yb FCC	71 Lu HCP
		**	89 Ac FCC	90 Th FCC	91 Pa TETR	92 U ORTH	93 Np ORTH	94 Pu MON	95 Am DHCP	96 Cm DHCP	97 Bk DHCP	98 Cf DHCP	99 Es FCC	100 Fm [FCC]	101 Md [FCC]	102 No [FCC]	103 Lr [HCP]

Teoría de Sommerfeld de los metales



Teoría de Sommerfeld de los metales



Teoría de Sommerfeld de los metales

$$n = 0.6022 \times 10^{24} \frac{Z\rho_m}{A}$$

Número de electrones por cm^3

$$\frac{V}{N} = \frac{1}{n} = \frac{4\pi r_s^3}{3}; \quad r_s = \left(\frac{3}{4\pi n} \right)^{1/3}$$

Distancia media entre e^-

$$a_0 = \hbar^2/me^2 = 0.529 \times 10^{-8} \text{ cm}$$

Radio de Bohr

Teoría de Sommerfeld de los metales

$$n = 0.6022 \times 10^{24} \frac{Z\rho_m}{A}$$

Número de electrones por cm³

$$\frac{V}{N} = \frac{1}{n} = \frac{4\pi r_s^3}{3}; \quad r_s = \left(\frac{3}{4\pi n} \right)^{1/3}$$

Distancia media entre e⁻

$$a_0 = \hbar^2/me^2 = 0.529 \times 10^{-8} \text{ cm}$$

Radio de Bohr

typically of order 10^{22} conduction electrons per cubic centimeter
from 0.91×10^{22} for cesium up to 24.7×10^{22} for beryllium.

Teoría de Sommerfeld de los metales

Table 1.1

FREE ELECTRON DENSITIES OF SELECTED METALLIC ELEMENTS^a

ELEMENT	Z	n ($10^{22}/\text{cm}^3$)	$r_s(\text{\AA})$	r_s/a_0
Li (78 K)	1	4.70	1.72	3.25
Na (5 K)	1	2.65	2.08	3.93
K (5 K)	1	1.40	2.57	4.86
Rb (5 K)	1	1.15	2.75	5.20
Cs (5 K)	1	0.91	2.98	5.62
Cu	1	8.47	1.41	2.67
Ag	1	5.86	1.60	3.02
Au	1	5.90	1.59	3.01
Be	2	24.7	0.99	1.87
Mg	2	8.61	1.41	2.66
Ca	2	4.61	1.73	3.27
Sr	2	3.55	1.89	3.57
Ba	2	3.15	1.96	3.71

Teoría de Sommerfeld de los metales

$$f_B(\mathbf{v}) = n \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} e^{-mv^2/2k_B T}$$

Distribución de velocidades de Boltzmann
Usada en el **modelo de Drude** (clásico)

$$f(\mathbf{v}) = \frac{(m/h)^3}{4\pi^3} \frac{1}{\exp \left[\left(\frac{1}{2}mv^2 - k_B T_0 \right) / k_B T \right] + 1}$$

25 años más tarde ... distribución de Fermi-Dirac --- **Base del modelo de Sommerfeld**

Son muy distintas a temperaturas $< T_{\text{ambiente}}$

Teoría de Sommerfeld de los metales

Modelo: Gas de electrones libres e independientes (sin interacción e-e)
con background de carga positiva uniforme (neutralidad de carga)

Ecuación de Schrödinger para un electrón libre:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r})$$

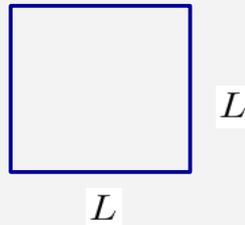
Autoestados:
(ondas planas)

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

Autoenergías:

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

Notar la normalización
en una caja de lado L



$$3D : V = L^3$$

$$2D : A = L^2$$

$$1D : L = L^1$$

Teoría de Sommerfeld de los metales

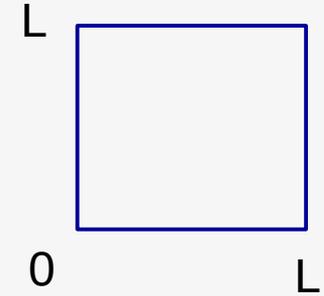
Condiciones periódicas de contorno

sobre $\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$

$$\psi(x + L) = \psi(x)$$

$$\psi(y + L) = \psi(y)$$

$$\psi(z + L) = \psi(z)$$



$$k_x = \frac{2\pi}{L} n_x$$

$$k_y = \frac{2\pi}{L} n_y$$

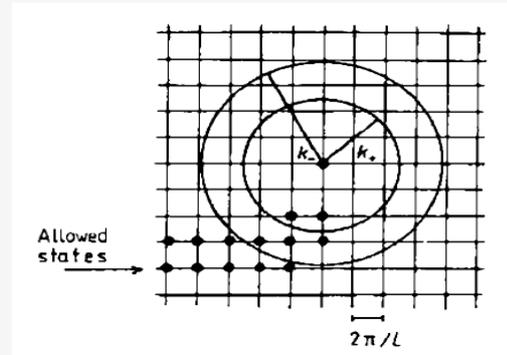
$$k_z = \frac{2\pi}{L} n_z$$

$$n_i \in \mathbb{Z}$$

Suponemos que L es grande y entonces k forma un cuasi-contínuo

El “paso” de la grilla en k es entonces: $\Delta k = \frac{2\pi}{L}$

Volumen asociado a un punto permitido en el espacio k: $\Delta k^3 = \left(\frac{2\pi}{L}\right)^3$



Teoría de Sommerfeld de los metales

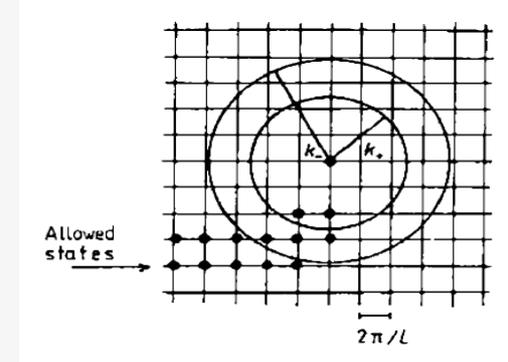
Volumen asociado a un punto permitido en el espacio k : $\Delta k^3 = \left(\frac{2\pi}{L}\right)^3$

Sumas en el espacio quasi-contínuo k y límite contínuo:

$$\sum_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}) = \frac{1}{\Delta k^3} \sum_{\mathbf{k}} \Delta k^3 f(\mathbf{k}) \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3\mathbf{k} f(\mathbf{k})$$

En d dimensiones:

$$\sum_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}) = \frac{1}{\Delta k^d} \sum_{\mathbf{k}} \Delta k^d f(\mathbf{k}) \rightarrow \left(\frac{L}{2\pi}\right)^d \int d^d k f(\mathbf{k}), \quad d = 1, 2, 3$$



Teoría de Sommerfeld de los metales

Propiedades del **estado fundamental** ($T = 0$) del gas de electrones

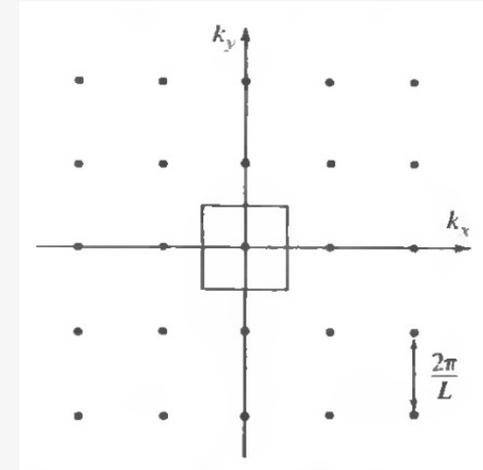
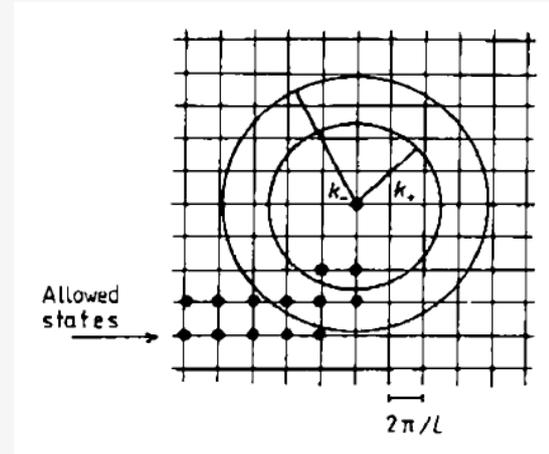
Supongamos N electrones, volumen V

Vamos llenando con electrones los estados del espacio k , hasta llenar una esfera aproximada de radio k_F :

$$\left(\frac{4\pi k_F^3}{3}\right) \left(\frac{V}{8\pi^3}\right) = \frac{k_F^3}{6\pi^2} V.$$

volumen de la esfera

densidad de puntos en espacio k



Teniendo en cuenta el espín:

$$N = 2 \cdot \frac{k_F^3}{6\pi^2} V = \frac{k_F^3}{3\pi^2} V.$$

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

Teoría de Sommerfeld de los metales

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

La densidad determina el k de Fermi

$$k_F = \frac{(9\pi/4)^{1/3}}{r_s} = \frac{1.92}{r_s} \longrightarrow k_F = \frac{3.63}{r_s/a_0} \text{ \AA}^{-1}$$

$$v_F = \left(\frac{\hbar}{m}\right) k_F = \frac{4.20}{r_s/a_0} \times 10^8 \text{ cm/sec}$$

Velocidad de Fermi

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = \left(\frac{e^2}{2a_0}\right) (k_F a_0)^2 = \frac{50.1 \text{ eV}}{(r_s/a_0)^2}$$

Energía de Fermi

Teoría de Sommerfeld de los metales

Energía del estado fundamental de N electrones :

$$E = 2 \sum_{k < k_F} \frac{\hbar^2}{2m} k^2$$

Para hacer el cálculo pasamos del quasi-continuo al continuo:

$$\lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} F(\mathbf{k}) = \int \frac{d\mathbf{k}}{8\pi^3} F(\mathbf{k}).$$

$$\frac{E}{V} = \frac{1}{4\pi^3} \int_{k < k_F} d\mathbf{k} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{1}{\pi^2} \frac{\hbar^2 k_F^5}{10m}$$

densidad de energía

Teoría de Sommerfeld de los metales

$$\frac{E}{V} = \frac{1}{4\pi^3} \int_{k < k_F} d\mathbf{k} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{1}{\pi^2} \frac{\hbar^2 k_F^5}{10m}$$

densidad de energía

$$N/V = k_F^3/3\pi^2$$



$$\frac{E}{N} = \frac{3}{10} \frac{\hbar^2 k_F^2}{m} = \frac{3}{5} \varepsilon_F = \frac{3}{5} k_B T_F$$

Introducimos:

$$T_F = \frac{\varepsilon_F}{k_B} = \frac{58.2}{(r_s/a_0)^2} \times 10^4 \text{ K}$$

Temperatura de Fermi

Table 2.1

FERMI ENERGIES, FERMI TEMPERATURES, FERMI WAVE VECTORS, AND FERMI VELOCITIES FOR REPRESENTATIVE METALS^a

ELEMENT	r_s/a_0	ε_F	T_F	k_F	v_F
Li	3.25	4.74 eV	$5.51 \times 10^4 \text{ K}$	$1.12 \times 10^8 \text{ cm}^{-1}$	$1.29 \times 10^8 \text{ cm/sec}$
Na	3.93	3.24	3.77	0.92	1.07
K	4.86	2.12	2.46	0.75	0.86
Rb	5.20	1.85	2.15	0.70	0.81
Cs	5.62	1.59	1.84	0.65	0.75
Cu	2.67	7.00	8.16	1.36	1.57

Guía 1: Modelos de Sommerfeld y Drude

Ejercicio 1

Para el gas de electrones en 2D y 1D calcular:

- (a) La densidad numérica de electrones en función de k_F
- (b) La velocidad y energía de Fermi en función de r_s y r_s/a_0
- (c) La energía total en función de k_F , E_F , T_F y r_s/a_0

En todos los ítems comparar con los resultados para el gas de electrones 3D

Resumen de la Clase 1

En esta clase vimos:

- Formalidades del curso
- Ubicación de los metales elementales en la Tabla Periódica
- Modelo de electrones de conducción en sólidos
- Densidad de electrones, n , r_s , r_s/a_0
- Estado fundamental del gas de electrones: momento, velocidad, energía y temperatura de Fermi
- Estados de un electrón libre: condiciones periódicas de contorno, quasi-contínuo de valores permitidos de k
- Densidad de estados en el espacio k : de sumas a integrales
- Energía total del estado fundamental