Clase 2 - viernes 26/03/2021

La clase pasada vimos:

- Modelo de Sommerfeld de los metales: gas de electrones libres
- Cantidades importantes del modelo: n, r_s, r_s/a_0, k_F, v_F, E_F, T_F
- Condiciones periódicas de contorno, quasi-contínuo de k
- Densidad de estados en el espacio k
- Energía total del estado fundamental

En esta clase vemos:

- Densidad de estados en general y para electrones libres
- Algunas propiedades termodinámicas
- Repaso del modelo de Drude

REPASO

Teoría de Sommerfeld de los metales

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

Distancia media entre e$^-$

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

La densidad determina el k de Fermi

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

Energía de Fermi

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

De sumas a integrales en 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 del estado fundamental

$$\frac{E}{N} = \frac{3}{10}\frac{\hbar^2 k_F^{\,2}}{m} = \frac{3}{5}\mathcal{E}_F$$

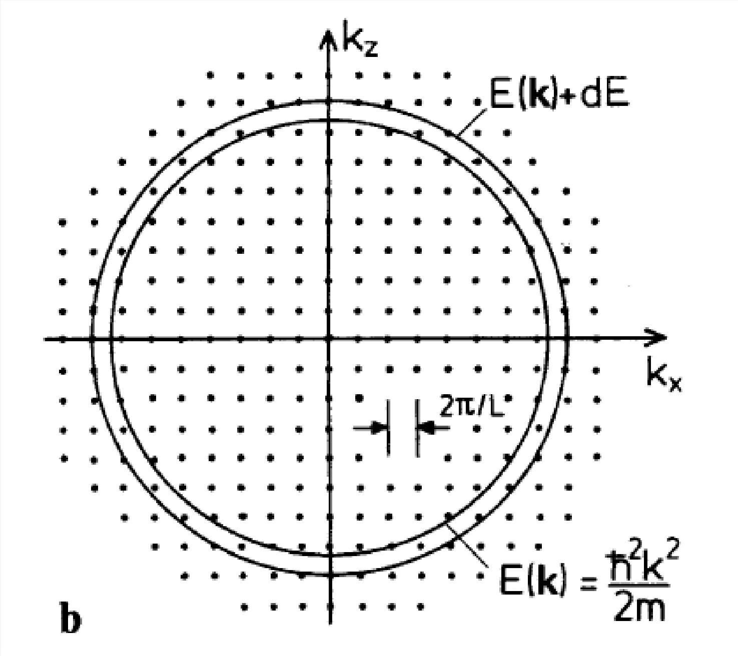
Energía por partícula en
el estado fundamental

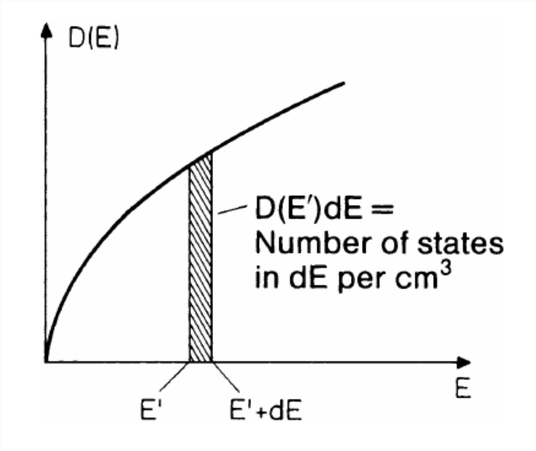
Densidad de estados

Teoría de Sommerfeld de los metales

Densidad de estados en función de la energía:

¿Cuántos estados permitidos hay entre las energías E y E+dE?





Teoría de Sommerfeld de los metales

Energía total a **temperatura no nula**

$$\mathcal{E}(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Energía de un electrón con momento k

$$f(\mathcal{E}) = \frac{1}{e^{(\mathcal{E}-\mu)/k_B T} + 1}$$

Distribución de Fermi-Dirac

$$U = 2 \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{E}(\mathbf{k}) f(\mathcal{E}(\mathbf{k}))$$

Energía total del gas de electrones

Dividiendo por V
y pasando al contínuo

$$u = \int \frac{d\mathbf{k}}{4\pi^3} \mathcal{E}(\mathbf{k}) f(\mathcal{E}(\mathbf{k}))$$

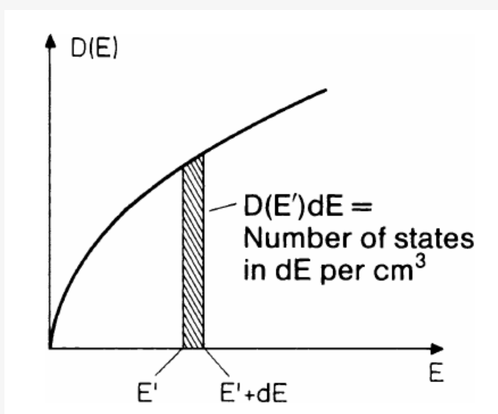
Densidad de energía

Teoría de Sommerfeld de los metales

$$g(\mathcal{E})\, d\mathcal{E} = \left(\frac{1}{V}\right) \times \text{[the number of one-electron levels in the energy range from } \mathcal{E} \text{ to } \mathcal{E} + d\mathcal{E}\text{]}.$$

Densidad de estados por unidad de volumen

Depende de la relacion de dispersión, o relación entre la energía y el momento



Para el caso 3D

$$\begin{aligned} g(\mathcal{E}) &= \frac{m}{\hbar^2\pi^2}\sqrt{\frac{2m\mathcal{E}}{\hbar^2}}, & \mathcal{E} > 0; \\ &= 0, & \mathcal{E} < 0. \end{aligned}$$

Teoría de Sommerfeld de los metales

$$u = \int \frac{d\mathbf{k}}{4\pi^3} \mathcal{E}(\mathbf{k}) f(\mathcal{E}(\mathbf{k}))$$

Densidad de energía

Notamos que la integral es sobre ***k*** pero en realidad sólo a través de $\mathcal{E} = \hbar^2 k^2/2m$,

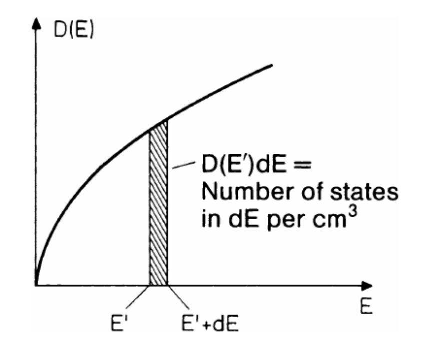
Hacemos un cambio de variable, de ***k*** a E :

$$\int \frac{d\mathbf{k}}{4\pi^3} F(\mathcal{E}(\mathbf{k})) = \int_0^\infty \frac{k^2\,dk}{\pi^2} F(\mathcal{E}(\mathbf{k})) = \int_{-\infty}^{\infty} d\mathcal{E}\, g(\mathcal{E}) F(\mathcal{E}).$$

Y se obtiene

$$g(\mathcal{E}) = \frac{m}{\hbar^2\pi^2}\sqrt{\frac{2m\mathcal{E}}{\hbar^2}}, \quad \mathcal{E} > 0;$$
$$= 0, \quad \mathcal{E} < 0.$$

(Hacerlo)



Teoría de Sommerfeld de los metales

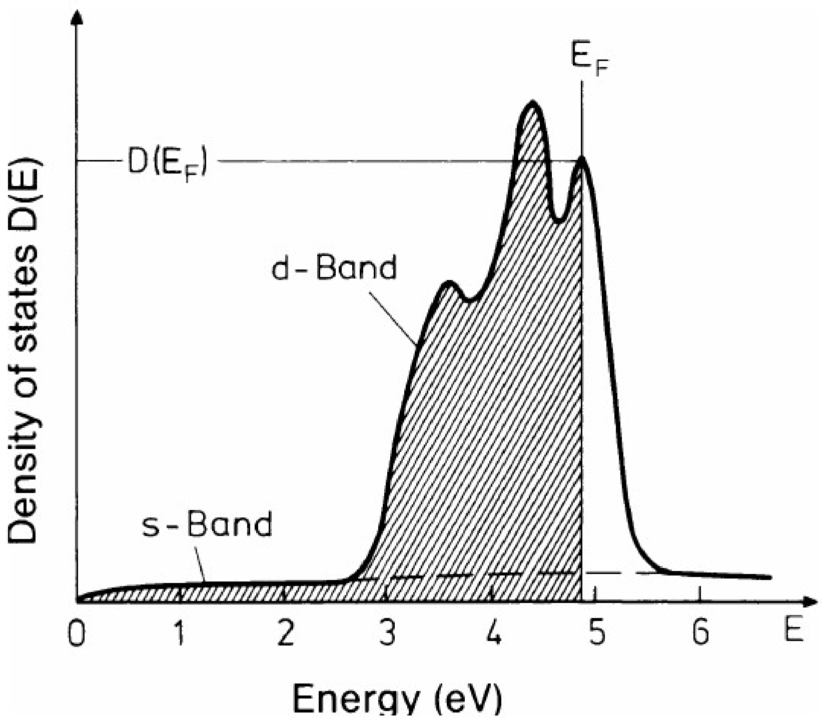


Fig. 6.9. Qualitative behavior of the density of states $D(E)$ for the conduction band of a transition metal. The strong contribution of the *d*-electrons in the vicinity of the Fermi level lies on top of that of the *s*-band (*partially dashed*)

(del libro de Ibach y Lüth)

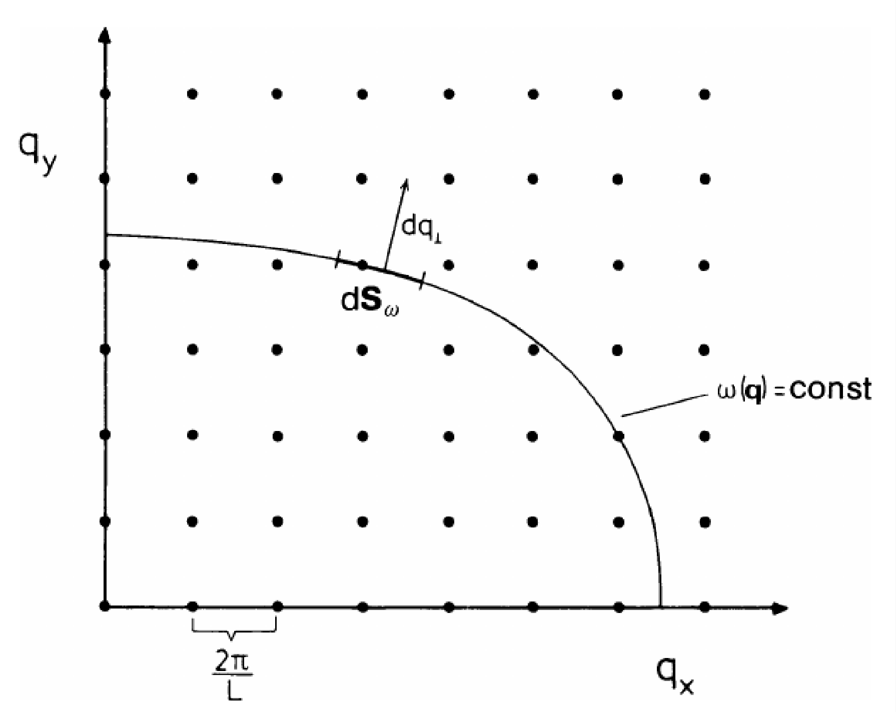
Teoría de Sommerfeld de los metales

Densidad de estados: fórmula general

$$g(\varepsilon)d\varepsilon = \frac{2}{(2\pi)^3}\int_{\varepsilon}^{\varepsilon+d\varepsilon} d^3k = \frac{2}{(2\pi)^3}\int_{\varepsilon}^{\varepsilon+d\varepsilon} d^2S_\varepsilon dk_\perp = \frac{2}{(2\pi)^3}d\varepsilon\int_{\varepsilon=const.}\frac{d^2S_\varepsilon}{|\mathrm{grad}_{\mathbf{k}}\varepsilon|}$$

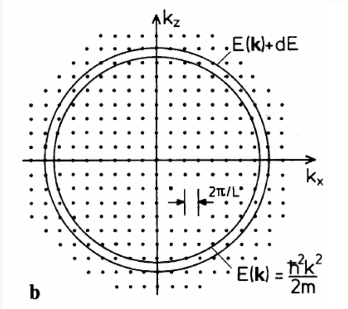
$$d\varepsilon = |\mathrm{grad}_{\mathbf{k}}\varepsilon|\, dk_\perp$$

$$g(\varepsilon) \;=\; \frac{2}{(2\pi)^3}\int_{\varepsilon=const.}\frac{d^2S_\varepsilon}{|\mathrm{grad}_{\mathbf{k}}\varepsilon|}$$



Ver Ibach y Lüth

Teoría de Sommerfeld de los metales



Ejemplo:

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \longrightarrow |\mathrm{grad}_{\mathbf{k}}\varepsilon| = \frac{\hbar^2 k}{m}$$

$$\begin{aligned} g(\varepsilon) &= \frac{2}{(2\pi)^3}\int_{\varepsilon=const.}\frac{d^2S_\varepsilon}{|\mathrm{grad}_{\mathbf{k}}\varepsilon|} \\ &= \frac{2}{(2\pi)^3}\frac{m}{\hbar^2 k}\int_{\varepsilon=const.} d^2S_\varepsilon \\ &= \frac{2}{(2\pi)^3}\frac{m}{\hbar^2 k}4\pi k^2 = \frac{m}{\hbar^2\pi^2}k = \frac{m}{\hbar^2\pi^2}\sqrt{\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}} \end{aligned}$$

OK

$$\begin{aligned} g(\mathcal{E}) &= \frac{m}{\hbar^2\pi^2}\sqrt{\frac{2m\mathcal{E}}{\hbar^2}}, && \mathcal{E} > 0; \\ &= 0, && \mathcal{E} < 0. \end{aligned}$$

Algunos cálculos termodinámicos

Teoría de Sommerfeld de los metales

Presión $$P = -\left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_N$$

$$E(V) = \frac{3}{5}N\varepsilon_F = \frac{3}{5}N\frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = \frac{3}{5}N\frac{\hbar^2}{2m}\left(3\pi^2\frac{N}{V}\right)^{2/3} = CV^{-2/3}$$

$$\longrightarrow \quad P = -\left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_N = \frac{2}{3}CV^{-5/3} = \frac{2}{3}\frac{E}{V}$$

Teoría de Sommerfeld de los metales

Compresibilidad $$B = \frac{1}{K} = -V\frac{\partial P}{\partial V}.$$

$$P = -\left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_N = \frac{2}{3}CV^{-5/3} = \frac{2}{3}\frac{E}{V}$$

$$\longrightarrow$$

$$B = \frac{5}{3}P = \frac{10}{9}\frac{E}{V} = \frac{2}{3}n\mathcal{E}_F$$

$$B = \left(\frac{6.13}{r_s/a_0}\right)^5 \times 10^{10}\ \text{dynes/cm}^2.$$

Teoría de Sommerfeld de los metales

Table 2.2
BULK MODULI IN 10^{10} DYNES/CM^2 FOR SOME TYPICAL METALS[a]

METAL	FREE ELECTRON B	MEASURED B
Li	23.9	11.5
Na	9.23	6.42
K	3.19	2.81
Rb	2.28	1.92
Cs	1.54	1.43
Cu	63.8	134.3
Ag	34.5	99.9
Al	228	76.0

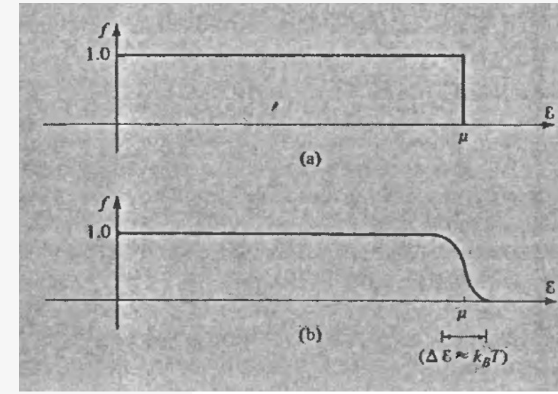
[a] The free electron value is that for a free electron gas at the observed density of the metal, as calculated from Eq. (2.37).

El orden de magnitud es correcto! Hay que tener en cuenta la presión del gas de electrones en el cálculo de la presión y la compresibilidad.

Teoría de Sommerfeld de los metales

Calor específico del gas de electrones

$$c_v = \frac{T}{V}\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_V = \left(\frac{\partial u}{\partial T}\right)_V, \qquad u = \frac{U}{V}.$$



$$f(\mathcal{E}) = \frac{1}{e^{(\mathcal{E}-\mu)/k_BT}+1}.$$

$$u = \int \frac{d\mathbf{k}}{4\pi^3}\,\mathcal{E}(\mathbf{k})f(\mathcal{E}(\mathbf{k})). \longrightarrow u = \int_{-\infty}^{\infty} d\mathcal{E}\, g(\mathcal{E})\mathcal{E} f(\mathcal{E})$$

$$u = u_0 + \frac{\pi^2}{6}(k_BT)^2 g(\mathcal{E}_F) \longrightarrow c_v = \left(\frac{\partial u}{\partial T}\right)_n = \frac{\pi^2}{3}k_B{}^2 T g(\mathcal{E}_F)$$

$$\longrightarrow c_v = \frac{\pi^2}{2}\left(\frac{k_BT}{\mathcal{E}_F}\right) n k_B.$$

Electrones libres

Modelo de Drude

Modelo de Drude

(Ashcroft – Mermin, Cap. 1)

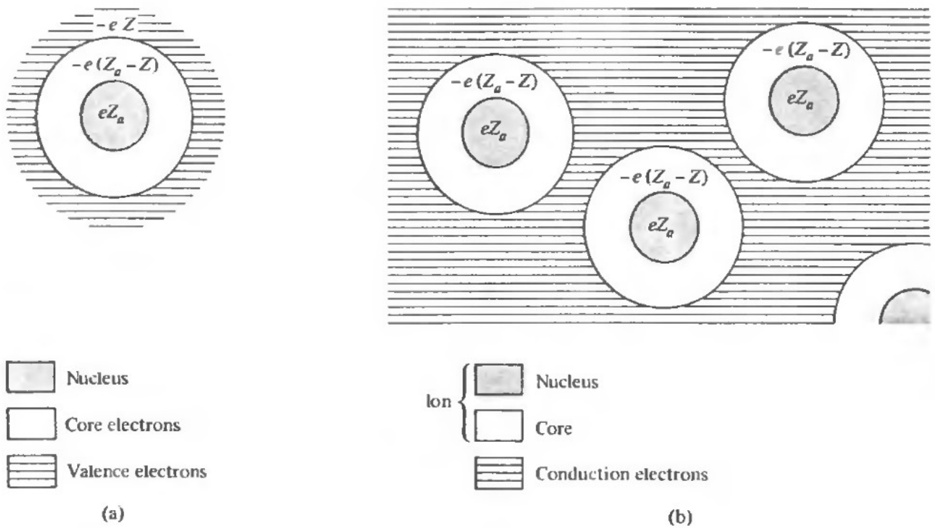


Figure 1.1
(a) Schematic picture of an isolated atom (not to scale). (b) In a metal the nucleus and ion core retain their configuration in the free atom, but the valence electrons leave the atom to form the electron gas.

Hipótesis

1. Dinámica clásica de electrones libres que colisionan con los iones del sólido.

2. Tiempo entre colisiones τ

3. Termalización en las colisiones.

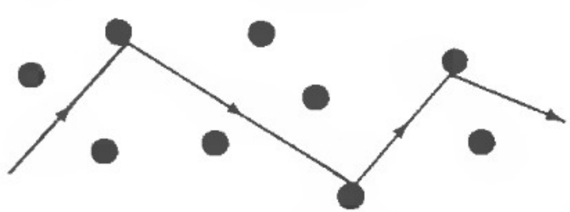


Figure 1.2
Trajectory of a conduction electron scattering off the ions, according to the naive picture of Drude.

Modelo de Drude

Conductividad eléctrica

$\sigma = 1/\rho$

$$\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E}; \quad \sigma = \frac{ne^2\tau}{m}.$$

Table 1.2 gives the resistivities of several representative metals at several temperatures. Note the strong temperature dependence. At room temperature the resistivity is roughly linear in T, but it falls away much more steeply as low temperatures are

Table 1.2
ELECTRICAL RESISTIVITIES OF SELECTED ELEMENTS[a]

ELEMENT	77 K	273 K	373 K	$\frac{(\rho/T)_{373\ \mathrm{K}}}{(\rho/T)_{273\ \mathrm{K}}}$
Li	1.04	8.55	12.4	1.06
Na	0.8	4.2	Melted	
K	1.38	6.1	Melted	
Rb	2.2	11.0	Melted	
Cs	4.5	18.8	Melted	
Cu	0.2	1.56	2.24	1.05
Ag	0.3	1.51	2.13	1.03
Au	0.5	2.04	2.84	1.02

Modelo de Drude

Podemos deducir el **tiempo de colisión o relajación** a partir de la resistividad:

$$\tau = \left(\frac{0.22}{\rho_\mu}\right)\left(\frac{r_s}{a_0}\right)^3 \times 10^{-14} \text{ sec.}$$

Resistividad en μohm-cm

Note that at room temperatures τ is typically 10^{-14} to 10^{-15} sec.

mean free path, $\ell = v_0\tau$,

$$\tfrac{1}{2}mv_0{}^2 = \tfrac{3}{2}k_BT.$$

Equipartición de la energía

mean free path of 1 to 10 Å.

Aparentemente consistente con la hipótesis de colisiones con los iones

this classical estimate of v_0 is an order of magnitude too small at room temperatures.

Resumen de la Clase 2

En esta clase vimos:

Densidad de estados en general y para electrones libres

Algunas propiedades termodinámicas

Repaso del modelo de Drude

Guía 1: Modelos de Sommerfeld y Drude

Ejercicio 2

Deducir las expresiones de la densidad de estados en sistemas 2D y 1D y aplicarlas a los electrones libres.

Ejercicio 3

Calcular la densidad de estados de electrones en una red de tipo cúbico/cuadrada resuelta con el modelo tight-binding en 3D, 2D y 1D.