

Guía 1: Modelos de Sommerfeld y Drude

30 de marzo de 2021

Problema 2

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

Solución 1

Queremos hallar la densidad de estados $g(\varepsilon)$ que se define como

$$g(\varepsilon) = \frac{dn}{d\varepsilon} \quad (1)$$

siendo n el número de estados en el volumen V . Y, para el caso de electrones libres, la energía viene dada por

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (2)$$

Primero, calculamos n para los casos de 2D y 1D. El número de estados en V es

$$N = 2 \sum_{\vec{k}} 1 = \frac{2}{(\Delta k)^d} \sum_{\vec{k}} (\Delta k)^d \quad (3)$$

Pasamos del cuasi-continuo al continuo recordando que el volumen que ocupa un estado en el espacio \vec{k} d -dimensional es $(\Delta k)^d = (2\pi/L)^d$, de donde

$$N = 2 \left(\frac{L}{2\pi} \right)^d \int d^d k \quad (4)$$

Aplicando la ec. (4) para $d = 1, 2$ resulta:

$$N^{1D} = 2 \left(\frac{L}{2\pi} \right) \int_{-k}^k dk' = \frac{2kL}{\pi} \Rightarrow \boxed{n^{1D} = \frac{2k}{\pi}} \quad (5)$$

$$N^{2D} = 2 \left(\frac{L}{2\pi} \right)^2 \int_0^k 2\pi k' dk' = \frac{k^2 L^2}{2\pi} \Rightarrow \boxed{n^{2D} = \frac{k^2}{2\pi}} \quad (6)$$

Luego, reescribimos (5) y (6) en términos de ε utilizando la ecuación (2),

$$n^{1D} = \frac{2}{\pi} \sqrt{\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}} \quad y \quad n^{2D} = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2} \right) = \frac{m\varepsilon}{\pi\hbar^2} \quad (7)$$

y, finalmente, calculamos $g(\varepsilon)$ como:

$$g(\varepsilon)^{1D} = \frac{dn^{1D}}{d\varepsilon} = \frac{2}{\pi\hbar} \sqrt{2m} \frac{d}{d\varepsilon}(\sqrt{\varepsilon}) \Rightarrow \boxed{g(\varepsilon)^{1D} = \frac{1}{\pi\hbar} \sqrt{\frac{2m}{\varepsilon}}} \quad (8)$$

$$g(\varepsilon)^{2D} = \frac{dn^{2D}}{d\varepsilon} = \frac{m}{\pi\hbar^2} \frac{d\varepsilon}{d\varepsilon} \Rightarrow \boxed{g(\varepsilon)^{2D} = \frac{m}{\pi\hbar^2}} \quad (9)$$

Las ecuaciones (8) y (9) son válidas para los casos donde $\varepsilon > 0$, mientras que para $\varepsilon < 0$ se tiene $g(\varepsilon) = 0$.

En la Figura 1 se presenta el gráfico de $g(\varepsilon)$ para $d = 1, 2, 3$. Es importante notar que para el caso en 2D la densidad de estados es constante.

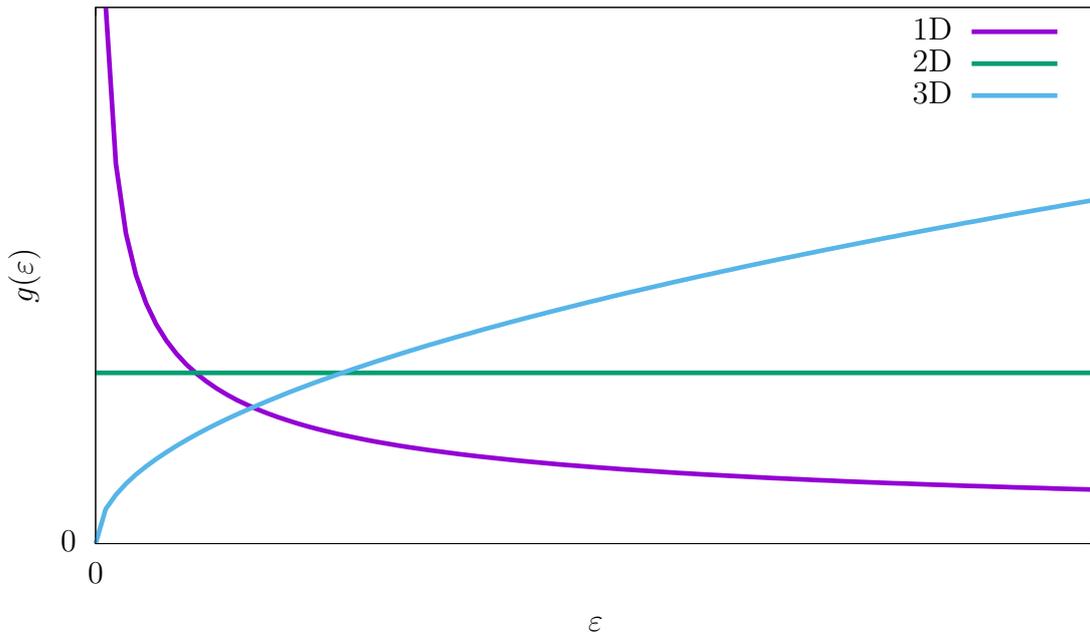


Figura 1: Densidad de estados $g(\varepsilon)$ para 1D, 2D y 3D

Solución 2

El número de estados entre las superficies de energía $\varepsilon(\vec{k})$ y $\varepsilon(\vec{k}) + d\varepsilon$ es

$$dN = 2 \left(\frac{L}{2\pi} \right)^3 \int_{\varepsilon}^{\varepsilon+d\varepsilon} d^3k \quad (10)$$

donde $d^3k = dS_{\varepsilon} dk$. Luego,

$$d\varepsilon = |\text{grad}_{\vec{k}}\varepsilon| dk \Rightarrow dk = \frac{d\varepsilon}{|\text{grad}_{\vec{k}}\varepsilon|} \quad (11)$$

Reemplazando (11) en (10) y dado que $dn = dN/V = g(\varepsilon)d\varepsilon$ (con $V = L^3$) resulta:

$$g(\varepsilon)^{3D} = \frac{2}{(2\pi)^3} \int_{\varepsilon=cte} \frac{dS_{\varepsilon}}{|\text{grad}_{\vec{k}}\varepsilon|} \quad (12)$$

donde, para el caso de electrones libres, se tiene $|\text{grad}_{\vec{k}}\varepsilon| = \hbar^2 k/m$ y la densidad de estados en 3D es

$$\boxed{g(\varepsilon)^{3D} = \frac{m}{\hbar^2 \pi^2} \sqrt{\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}}} \quad (13)$$

Ahora, seguimos el procedimiento análogo para 2D y 1D.

Para 2D, dN viene dado por:

$$dN = 2 \left(\frac{L}{2\pi} \right)^2 \int_{\varepsilon}^{\varepsilon+d\varepsilon} d^2k \quad d^2k = dl_{\varepsilon} dk \quad (14)$$

Entonces,

$$g(\varepsilon)^{2D} = \frac{2}{(2\pi)^2} \int_{\varepsilon=cte} \frac{dl_{\varepsilon}}{|\text{grad}_{\vec{k}}\varepsilon|} = \frac{1}{2\pi^2} \frac{m}{\hbar^2 k(\varepsilon)} 2\pi k(\varepsilon) \Rightarrow \boxed{g(\varepsilon)^{2D} = \frac{m}{\pi \hbar^2}} \quad (15)$$

Para 1D,

$$dN = 2 \left(\frac{L}{2\pi} \right) \int_{\varepsilon}^{\varepsilon+d\varepsilon} dk \quad (16)$$

de donde

$$g(\varepsilon)^{1D} = \frac{2}{(2\pi)} \frac{2}{|\text{grad}_{\vec{k}}\varepsilon|} = \frac{2m}{\pi \hbar^2 k(\varepsilon)} \Rightarrow \boxed{g(\varepsilon)^{1D} = \frac{1}{\pi \hbar} \sqrt{\frac{2m}{\varepsilon}}} \quad (17)$$

Solución 3

Para empezar partimos desde la ecuación de la energía total para el gas de electrones:

$$U = 2 \sum_{\bar{k}} \mathcal{E}(\bar{k}) f(\mathcal{E}(\bar{k})) \quad (18)$$

Donde $\mathcal{E}(\bar{k})$ es la energía de un electrón con momento \bar{k} , y $f(\mathcal{E}(\bar{k}))$ nuestra función de distribución.

$$f(\mathcal{E}(\bar{k})) = \frac{1}{e^{(\mathcal{E}-\mu)/k_B T} + 1} \rightarrow \text{Distr. de Fermi - Dirac} \quad (19)$$

$$\mathcal{E}(\bar{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \rightarrow \text{gas de electrones libres} \quad (20)$$

- Ahora vamos a calcular la densidad de energía:

$$u = \frac{U}{V} \quad (21)$$

y para calcular el volumen tenemos que hacer $V = (L)^d$. Entonces para 1D la densidad de energía nos queda:

$$u = \frac{2}{L} \sum_{\bar{k}} \mathcal{E}(\bar{k}) f(\mathcal{E}(\bar{k})) \quad (22)$$

Considerando que normalmente tenemos un material lo suficientemente grande (N grande), podemos pasar de nuestra expresión discreta al continuo por medio de:

$$\sum_{\bar{k}} f(\bar{k}) = \frac{1}{(\Delta k)^d} \sum_{\bar{k}} (\Delta k)^d f(\bar{k}) \rightarrow \left(\frac{L}{2\pi}\right)^d \int d^d k f(\bar{k}) \quad (23)$$

Con $d = 1, 2$ y 3 .

Entonces para nuestro caso particular nos queda:

$$u = \frac{2}{L} \frac{L}{2\pi} \int dk \mathcal{E}(\bar{k}) f(\mathcal{E}(\bar{k})) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \mathcal{E}(\bar{k}) f(\mathcal{E}(\bar{k})) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} dk \mathcal{E}(\bar{k}) f(\mathcal{E}(\bar{k})) \quad (24)$$

Ahora, como sabemos de ec.(20) podemos pasar de una integral en k a una integral en \mathcal{E} en ec.(24), y para esto hacemos:

$$\mathcal{E}(\bar{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \rightarrow k = \sqrt{\frac{2m\mathcal{E}}{\hbar^2}} \rightarrow dk = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \frac{d\mathcal{E}}{2\sqrt{\mathcal{E}}} \quad (25)$$

Y

$$\mathcal{F}(\mathcal{E}(\bar{k})) = \mathcal{E}(\bar{k}) f(\mathcal{E}(\bar{k})) \quad (26)$$

por lo tanto podemos escribir

$$u = \int_0^{\infty} \frac{2}{\pi} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2 \mathcal{E}}} \frac{1}{2} \mathcal{F}(\mathcal{E}(\bar{k})) d\mathcal{E} = \int_0^{\infty} \frac{1}{\hbar\pi} \sqrt{\frac{2m}{\mathcal{E}}} \mathcal{F}(\mathcal{E}(\bar{k})) d\mathcal{E} \quad (27)$$

Y por la definición de densidad de estados sabemos que

$$u = \int_{-\infty}^{\infty} g(\mathcal{E}) \mathcal{F}(\mathcal{E}) d\mathcal{E} \quad (28)$$

entonces con las ecs.(27) y (28) podemos escribir

$$\int_0^{\infty} \frac{1}{\hbar\pi} \sqrt{\frac{2m}{\mathcal{E}}} \mathcal{F}(\mathcal{E}(\bar{k})) d\mathcal{E} = \int_0^{\infty} g(\mathcal{E}) \mathcal{F}(\mathcal{E}) d\mathcal{E} \quad (29)$$

De donde podemos concluir que:

$$g(\mathcal{E}) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2m}{\mathcal{E}}} \frac{1}{\pi\hbar}, & \mathcal{E} > 0 \\ 0, & \mathcal{E} < 0 \end{cases} \quad (30)$$

Ahora para el caso 2D, partimos nuevamente de ec.(18):

$$U = 2 \sum_{\bar{k}} \mathcal{E}(\bar{k}) f(\mathcal{E}(\bar{k})) \quad (31)$$

Y la densidad de energía

$$u = \frac{U}{V}; \text{ donde } V = (L)^d = L^2 \rightarrow u = \frac{2}{L^2} \sum_{\bar{k}} \mathcal{E}(\bar{k}) f(\mathcal{E}_{(\bar{k})}) \quad (32)$$

y para pasar al continuo usamos la relación de ec.(23) y la densidad de energía para 2D nos queda:

$$u = \frac{2}{L^2} \frac{L^2}{4\pi^2} \int d\bar{k} \mathcal{E}(\bar{k}) f(\mathcal{E}_{(\bar{k})}) = \frac{1}{2\pi^2} \int d\bar{k} \mathcal{E}(\bar{k}) f(\mathcal{E}_{(\bar{k})}) \quad (33)$$

Que podemos escribir en coordenadas polares

$$u = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^{2\pi} \int_0^\infty k dk d\theta \mathcal{E}(\bar{k}) f(\mathcal{E}_{(\bar{k})}) \quad (34)$$

y haciendo la integral en θ nos queda

$$u = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty k dk \mathcal{E}(\bar{k}) f(\mathcal{E}_{(\bar{k})}) \quad (35)$$

y para pasar de esta integral en k a una integral en \mathcal{E} usamos las relaciones de ecs.(25) y (26), y luego nos queda:

$$u = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \sqrt{\frac{2m\mathcal{E}}{\hbar^2}} \sqrt{\frac{2m}{\hbar\mathcal{E}}} \frac{d\mathcal{E}}{2} \mathcal{F}(\mathcal{E}_{(\bar{k})}) \quad (36)$$

y simplificando un poco la expresión

$$u = \int_0^\infty \frac{m}{\pi\hbar^2} \mathcal{F}(\mathcal{E}_{(\bar{k})}) d\mathcal{E} \quad (37)$$

que por ec.(28) sabemos que podemos escribir la siguiente igualdad:

$$\int_0^\infty g(\mathcal{E}) \mathcal{F}(\mathcal{E}) d\mathcal{E} = \int_0^\infty \frac{m}{\pi\hbar^2} \mathcal{F}(\mathcal{E}_{(\bar{k})}) d\mathcal{E} \quad (38)$$

De donde podemos concluir que

$$g(\mathcal{E}) = \begin{cases} \frac{m}{\pi\hbar^2}, & \mathcal{E} > 0 \\ 0, & \mathcal{E} < 0 \end{cases} \quad (39)$$