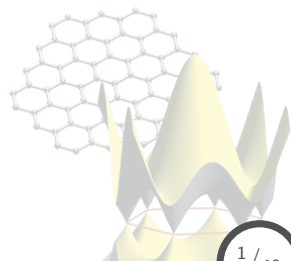
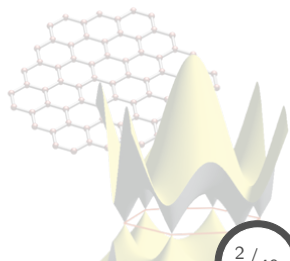


4. Modelo del gas de electrones libres



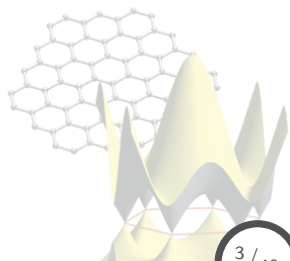
Contenido: Tema 04

- 4. Modelo del gas de electrones libres
 - 4.1 Modelo del gas de Fermi
 - 4.2 Gas de electrones en tres dimensiones
 - 4.3 Capacidad calorífica, conductividad eléctrica y térmica del gas de electrones
 - 4.4 Movimiento en campos magnéticos: Efecto Hall



Contenido: Tema 04

- 4. Modelo del gas de electrones libres
 - 4.1 Modelo del gas de Fermi
 - 4.2 Gas de electrones en tres dimensiones
 - 4.3 Capacidad calorífica, conductividad eléctrica y térmica del gas de electrones
 - 4.4 Movimiento en campos magnéticos: Efecto Hall



Modelo del gas de Fermi

Motivación del modelo del gas de electrones libres

La motivación del **modelo del gas de electrones libres** fue el poder explicar propiedades tales como:

Conductividad eléctrica,

Conductividad térmica,

Capacidad calorífica,

Susceptibilidad magnética,

de los metales **alcalinos** y **nobles**.

<http://www.kf-split.hr/periodic/en/>

The image shows a periodic table of elements with a legend and highlighted groups. The legend includes: Metal (blue), Semimetal (orange), Nonmetal (green), Alkali metal (1), Alkaline earth metal (2), Transition metals (3-10), Lanthanide (La-Lu), Actinide (Ac-Lr), Chalcogens element (16), Halogens element (17), and Noble gas (18). The groups are labeled IA through VIIIA. The elements are color-coded according to the legend. A red box highlights the alkali metals (Group IA) and noble gases (Group VIIIA). A blue box highlights the alkaline earth metals (Group IIA). A yellow box highlights the transition metals (Groups IIIA through VIIIA). A green box highlights the chalcogens (Group VIA) and halogens (Group VIIA). A purple box highlights the noble gases (Group VIIIA). The legend also includes a section for STANDARD STATE (25 °C, 101 kPa) with symbols for gas (Ne), solid (Fe), liquid (Ga), and synthetic (Tl).

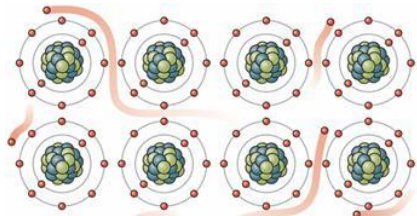
1	IA	RELATIVE ATOMIC MASS (A)										GROUP IUPAC						18	VIIIA		
1	H 1.0079 HYDROGEN	GROUP IUPAC		13 <td>IIIA</td> <td colspan="10">GROUP CAS</td> <td>18<td>VIIIA</td></td>	IIIA	GROUP CAS										18 <td>VIIIA</td>	VIIIA				
2	Li 6.941 LITHIUM	Be 9.0122 BERYLLIUM	ATOMIC NUMBER		5	10.811	SYMBOL										B	10.811	Ne 20.180 NEON		
3	Na 22.990 SODIUM	Mg 24.305 MAGNESIUM	ELEMENT NAME		BORON											Al 26.982 ALUMINUM	Si 28.086 SILICON	P 30.974 PHOSPHORUS	S 32.065 SULPHUR	Cl 35.453 CHLORINE	Ar 39.948 ARGON
4	K 39.098 POTASSIUM	Ca 40.078 CALCIUM	Sc 44.956 SCANDIUM	Ti 47.867 TITANIUM	V 50.942 VANADIUM	Cr 51.996 CHROMIUM	Mn 54.938 MANGANESE	Fe 55.845 IRON	Co 58.933 COBALT	Ni 58.693 NICKEL	Cu 63.546 COPPER	Zn 65.39 ZINC	Ga 69.723 GALLIUM	Ge 72.64 GERMANIUM	As 74.922 ARSENIC	Se 78.95 SELENIUM	Br 79.904 BROMINE	Kr 83.80 KRYPTON			
5	Rb 87.62 RUBIDIUM	Sr 87.62 STRONTIUM	Y 88.906 YTTORIUM	Zr 91.224 ZIRCONIUM	Nb 92.906 NIOBIUM	Mo 95.94 MOLYBDENUM	Tc 98 TECHNETIUM	Ru 101.07 RUTHENIUM	Rh 102.91 RHODIUM	Pd 106.42 PALLADIUM	Ag 107.87 SILVER	Cd 112.4 CADMIUM	In 114.82 INDIUM	Sn 118.71 TIN	Sb 121.76 ANTIMONY	Te 127.60 TELLURIUM	I 126.90 IODINE	Xe 131.29 XENON			
6	Cs 132.91 CAESIUM	Ba 137.33 BARIUM	La-Lu 57-71 Lanthanide	Hf 178.49 HAFNIUM	Ta 180.95 TANTALUM	W 183.84 TUNGSTEN	Re 186.21 RHENIUM	Os 190.23 OSMIUM	Ir 192.22 IRIDIUM	Pt 195.08 PLATINUM	Au 196.97 GOLD	Hg 200.59 MERCURY	Tl 204.38 THALLIUM	Pb 207.2 LEAD	Bi 208.98 BISMUTH	Po (209) POLONIUM	At (210) ASTATINE	Rn (222) RADON			
7	Fr (223) FRANCIUM	Ra (226) RADIUM	Ac-Lr 89-103 Actinide	Rf (261) RUTHERFORDIUM	Db (262) DUBNIUM	Sg (266) SEABORGIUM	Bh (264) BOHRILIUM	Hs (277) HASSIUM	Mt (268) MEITNERIUM	Uun (281) UNUNUNIUM	Uuu (272) UNUNVIUM	Uub (285) UNUNBIUM	Uuq (289) UNUNQUADIUM								

Modelo del gas de Fermi

Metales alcalinos y nobles

Los metales **alcalinos** y **nobles** poseen en las capas electrónicas más externas estados de **valencia** de simetría s .¹

Considerando un cristal de Na,



Conf. elec. $\Rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$,

Est. cristalina \Rightarrow bcc,

$$a_0 = 4.225 \text{ \AA},$$

$$R_{ion}(\text{Na}^+) = 0.98 \text{ \AA}.$$

Calculando la fracción de volumen ocupado por los iones,

$$V_{cell} = a_0^3 = 75.4 \text{ \AA}^3,$$

$$V_{ion} = 8\pi R_{ion}^3/3 = 7.88 \text{ \AA}^3,$$

$$\Rightarrow f_{ion} = \frac{V_{ion}}{V_{cell}} = 10.5\%,$$

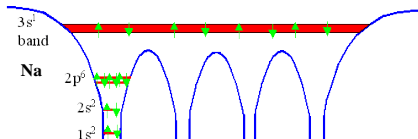
casi el **90%** del espacio es ocupado por la nube electrónica, donde en tales sistemas se llega a un **camino libre medio** de hasta 10^8 dist. interatómicas (aprox. 1cm).

¹Aún los metales nobles, ya que tienen capas d llenas.

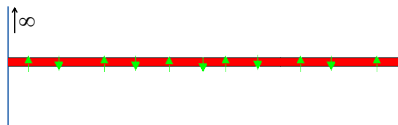
Modelo del gas de Fermi

Modelo del gas de electrones libres

Potencial real



Potencial modelo



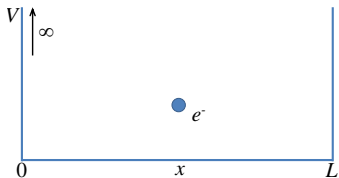
El modelo de **gas de electrones libres (gas de Fermi)** es el modelo más simple para describir un metal, y considera lo siguiente:

- El cristal contempla un número fijo de N iones positivos, considerados como carga de **background**.
- Se cuenta con M electrones, los cuales no interaccionan con los iones o entre ellos, moviéndose **libremente** por el cristal.
- Los electrones cumplen con el **principio de exclusión de Pauli**.

Modelo del gas de Fermi

Modelo del gas de electrones libres en una dimensión

Considerando en el **modelo del gas de electrones libres** un electrón e^- de masa m , en una caja de potencial unidimensional de longitud L , cuyas barreras son infinitas,



siendo la ec. de Schrödinger:

$$H\psi = \epsilon\psi \quad \forall \quad V = 0,$$

$$H = p^2/2m \quad \forall \quad p = -i\hbar\partial_x,$$

$$\therefore -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\psi = \epsilon\psi,$$

$$\text{con: } \psi = 0 \quad \forall \quad x = 0, L.$$

Resolviendo la ecuación anterior, se obtendrá la sig. información:

$$\psi_n \leftarrow \text{orbitales,}$$

$$\epsilon_n \leftarrow \text{energía de } \psi_n,$$

por tanto, la forma general de la ecuación es:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\psi_n(x) = \epsilon_n\psi_n(x).$$

Modelo del gas de Fermi

Modelo del gas de electrones libres en una dimensión

De la ecuación anterior,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 \psi_n(x) = \epsilon_n \psi_n(x).$$

se obtiene como solución,

$$\psi_n(x) = A \text{Sen} \left(\frac{n\pi}{L} x \right) = A \text{Sen} \left(\frac{2\pi}{\lambda_n} x \right),$$

donde $\lambda_n = 2L/n \rightarrow L = n\lambda_n/2$.

arrojando el **espectro de energía**,

$$\epsilon_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{L} \right)^2 n^2,$$

siendo la ocupación de cada nivel de energía de **máximo** dos electrones.

Cada e^- está caracterizado por los sig. **núm. cuánticos**,

$n \rightarrow$ principal,

$m_s = \pm 1/2 \rightarrow$ magnético.

Por ejemplo, para un sist. de 6 e^- el estado base será:

n	m_s	Ocp.	n	Total e^-
1	\uparrow	1	1	1
1	\downarrow	2	2	2
2	\uparrow	1	3	3
2	\downarrow	2	4	4
3	\uparrow	1	5	5
3	\downarrow	2	6	6

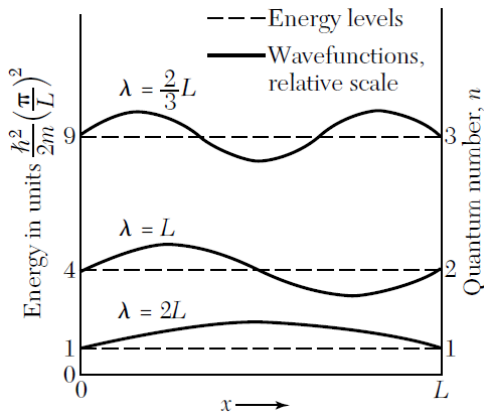
Modelo del gas de Fermi

Modelo del gas de electrones libres en una dimensión

Calculando los valores de energía para cada nivel,

$$E_n = \frac{\epsilon_n}{\hbar^2 \pi^2 / 2mL^2} = n^2,$$

n	E_n	$\lambda_n = 2L/n$
1	1	$2L$
2	4	L
3	9	$2L/3$
4	16	$L/2$



en donde E_1 representa el estado de más **baja energía**, y λ_n la **longitud de onda** del orbital n .

Modelo del gas de Fermi

Modelo del gas de electrones libres en una dimensión: Energía de Fermi

Denotando,

n_F = nivel energético del **último** estado ocupado,

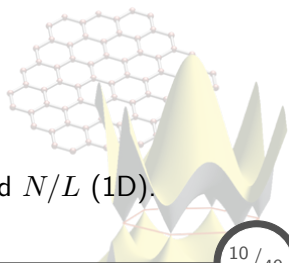
en donde se empiezan a poblar los niveles desde $n = 1$ (siendo éste el nivel más bajo) hasta el total de N electrones, entonces $2n_F = N$.²

Por tanto, se define la **energía de Fermi** ϵ_F , como la energía del **último** nivel ocupado (n_F):

$$\begin{aligned}\epsilon_F &= \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{L} \right)^2 n_F^2, \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi N}{2L} \right)^2 \quad \forall T = 0.\end{aligned}$$

en donde se observa que ϵ_F depende de la densidad N/L (1D).

²Considerando un número par de partículas N .



Modelo del gas de Fermi

Modelo del gas de electrones libres en una dimensión: Distribución Fermi-Dirac

Para tomar en cuenta los efectos de temperatura en la distribución de los niveles de energía, se considera la estadística de **Fermi-Dirac**, utilizando la siguiente función de distribución:

$$f(\epsilon) = \frac{1}{e^{(\epsilon-\mu)\beta} + 1} \quad \forall \quad \beta = \frac{1}{k_B T}.$$

Distribución de Fermi-Dirac: La probabilidad de que un orbital, a energía ϵ , sea ocupado en un gas ideal de electrones en equilibrio térmico.

En tal distribución, se tienen las siguientes características:

Potencial químico μ

$$\text{si } f = 0.5 \Rightarrow \epsilon = \mu,$$
$$\lim_{T \rightarrow 0} \mu = \epsilon_F \quad \forall \quad \mu < \epsilon_F.$$

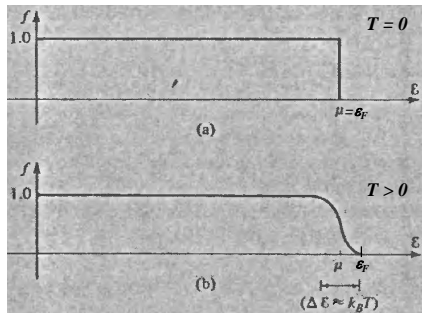
Función de distribución

$$\lim_{T \rightarrow 0} f(\epsilon) = \begin{cases} 1 & \epsilon < \mu, \\ 0 & \epsilon > \mu. \end{cases}$$

Modelo del gas de Fermi

Modelo del gas de electrones libres en una dimensión: Distribución Fermi-Dirac

Analizando el efecto de T en $f(\epsilon)$,



se observa que **sólo** los electrones en un rango de energía $\Delta \epsilon = k_B T$ podrán ser excitados.

Para cuantificar el efecto de T , se compara con la **temperatura de Fermi** de sistemas metálicos:

$$T_F = \frac{\epsilon_F}{k_B} \approx 10^4 \text{ K},$$

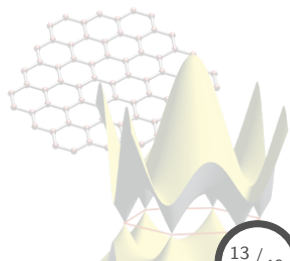
mientras que en condiciones de laboratorio se tiene $T = 300 \text{ K}$, por tanto el rango de energía de $f(\epsilon)$ afectado por T es:

$$T_F \approx 10^4 \text{ K} \ \& \ T \approx 10^2 \text{ K},$$
$$\Rightarrow \Delta \epsilon / \epsilon_F = T / T_F = 10^{-2},$$

\therefore sólo los e^- en el rango energía $\epsilon \in 0.01 \epsilon_F$ serán **excitados**.

Contenido: Tema 04

- 4. Modelo del gas de electrones libres
 - 4.1 Modelo del gas de Fermi
 - 4.2 Gas de electrones en tres dimensiones**
 - 4.3 Capacidad calorífica, conductividad eléctrica y térmica del gas de electrones
 - 4.4 Movimiento en campos magnéticos: Efecto Hall



Gas de electrones en tres dimensiones

Solución del sistema en 3D

Para el caso de un sistema en 3D:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \epsilon_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}),$$

en donde los e^- están confinados en un cubo de arista $L \therefore V = L^3$.

La sol. propuesta es del tipo:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = Ae^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}},$$

obteniendo la cte. A mediante las condiciones de **normalización**,

$$1 = \int_V \psi_{\mathbf{k}}^* \psi_{\mathbf{k}} d\mathbf{r},$$

$$\Rightarrow A = (1/V)^{1/2} = (1/L)^{3/2}.$$

Adicionalmente, los orbitales deben cumplir con las sig. condiciones de **frontera**:

$$\psi_{\mathbf{k}}(x, y, z) = \psi_{\mathbf{k}}(x + L, y, z),$$

$$\psi_{\mathbf{k}}(x, y, z) = \psi_{\mathbf{k}}(x, y + L, z),$$

$$\psi_{\mathbf{k}}(x, y, z) = \psi_{\mathbf{k}}(x, y, z + L),$$

lo cual arroja las siguientes relaciones para el vector \mathbf{k} ,

$$k_x = \frac{2n\pi}{L}, \quad k_y = \frac{2m\pi}{L}, \quad k_z = \frac{2l\pi}{L},$$

en donde $n, m, l \in \mathbb{Z}$.

Gas de electrones en tres dimensiones

Espectro de energía

Calculando ahora el espectro de energía,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \epsilon_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}),$$

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

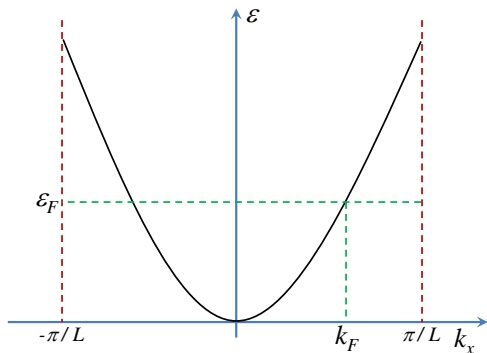
$$\Rightarrow \epsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2}{2m} |\mathbf{k}|^2,$$

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2}{2m} |k_x^2 + k_y^2 + k_z^2|,$$

en donde la **energía de Fermi** viene dada como,

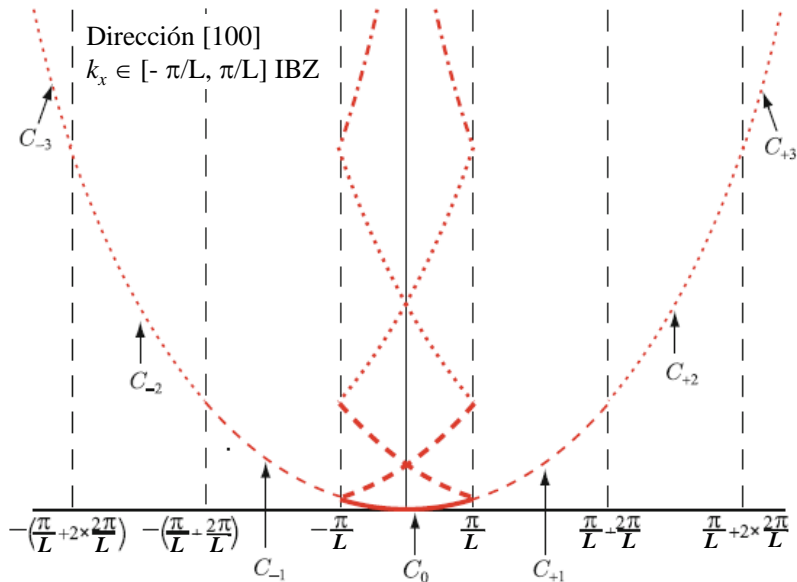
$$\epsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} |\mathbf{k}_F|^2.$$

La ecuación anterior representa una relación en 4D, por lo que para analizarla se escogen **camino de alta simetría**, como por ejemplo la dirección k_x en la IBZ: $k_x \in [-\pi/L, \pi/L]$.



Gas de electrones en tres dimensiones

Espectro de energía en esquema de zona extendida



Gas de electrones en tres dimensiones

Superficie de Fermi

Otra manera de representar la estructura electrónica es fijar el valor de la energía a la **energía de Fermi** ϵ_F ,

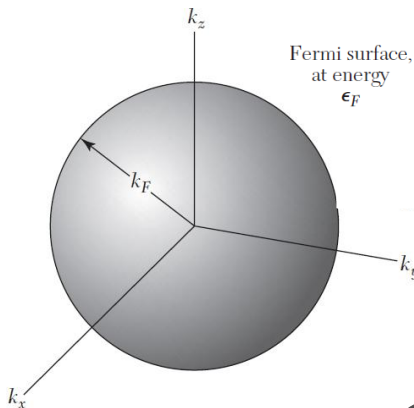
$$\epsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2}{2m} |k_x^2 + k_y^2 + k_z^2|^2 \Rightarrow \epsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} |\mathbf{k}_F|^2,$$

La ec. anterior representa una superficie en el espacio 3D, conocida como **superficie de Fermi**, que para el caso del electrón libre, es una **esfera** con radio k_F ,

$$N = 2 \frac{\text{vol. esfera de Fermi}}{\text{vol. IBZ}},$$

$$= 2 \frac{4\pi k_F^3/3}{(2\pi/L)^3},$$

$$k_F = \left(3\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{1/3}.$$



Gas de electrones en tres dimensiones

Densidad de estados

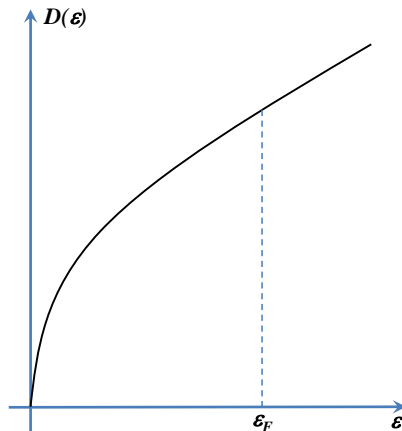
Calculando la **densidad de estados** $D(\epsilon) = dn/d\epsilon$ para el gas de Fermi confinado en una esfera de radio $k < k_F$,

$$\begin{aligned}n &= 2 \frac{\text{vol. esfera radio } k}{\text{vol. IBZ}}, \\&= 2 \frac{4\pi k^3/3}{(2\pi/L)^3} = \frac{V k^3}{3\pi^2}, \\&= \frac{V}{3\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \epsilon \right)^{3/2},\end{aligned}$$

en donde $\epsilon = \hbar^2 k^2 / 2m$.

Por tanto, la densidad de estados para el gas de Fermi es:

$$D(\epsilon) = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \epsilon^{1/2}.$$



Gas de electrones en tres dimensiones

Densidad de estados: Efecto de temperatura

Considerando los efectos de la temperatura en $D(\epsilon)$ mediante la función de distribución de **Fermi-Dirac**,

$$D(\epsilon) \rightarrow D(\epsilon)f(\epsilon) \quad \forall T > 0,$$

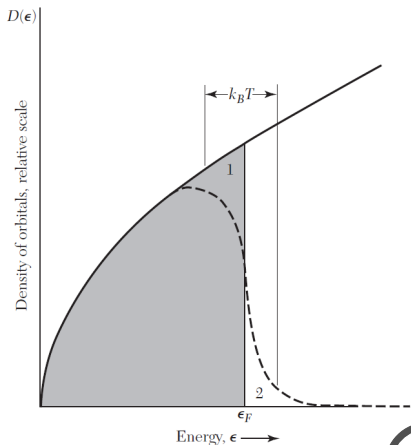
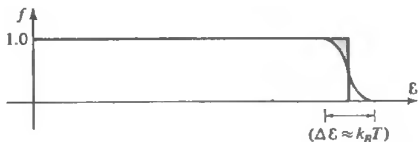
en donde,

$$f(\epsilon) = \frac{1}{e^{(\epsilon-\mu)\beta} + 1} \quad \forall \beta = \frac{1}{k_B T},$$

cumplíendose,

$$N = \int_0^{\epsilon_F} D(\epsilon) d\epsilon \quad \forall T = 0,$$

$$N = \int_0^{\infty} D(\epsilon) f(\epsilon) d\epsilon \quad \forall T > 0.$$



Gas de electrones en tres dimensiones

Velocidad de Fermi

Para conocer el significado de \mathbf{k} , se aplica el **operador de momento**

$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$ al orbital $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ obtenido:

$$\hat{\mathbf{p}}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = -i\hbar\nabla \left(\frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \right) = \hbar\mathbf{k} \left(\frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \right) = \hbar\mathbf{k}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

por tanto, $\hbar\mathbf{k}$ es el **eigenvalor** de $\hat{\mathbf{p}}$.

Sin embargo, el eigenvalor de $\hat{\mathbf{p}}$ es el **momento** $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$, entonces:

$$\mathbf{p} = m\mathbf{v} = \hbar\mathbf{k} \quad \therefore \quad \mathbf{v} = \frac{\hbar}{m}\mathbf{k},$$

lo cual representa la **velocidad** del e^- en el orbital $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$.

Ahora, para el caso del **vector de Fermi** \mathbf{k}_F , se obtiene la **velocidad de Fermi**,

$$v_F = \frac{\hbar}{m}k_F \quad \Rightarrow \quad v_F = \frac{\hbar}{m} \left(3\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{1/3} \quad \forall \quad k_F = \left(3\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{1/3}$$

Gas de electrones en tres dimensiones

Parámetros de metales al nivel de Fermi

Valency	Metal	Fermi wavevector, in cm^{-1}	Fermi velocity, in cm s^{-1}	Fermi energy, in eV	Fermi temperature $T_F = \epsilon_F/k_B$, in deg K
1	Li	1.11×10^8	1.29×10^8	4.72	5.48×10^4
	Na	0.92	1.07	3.23	3.75
	K	0.75	0.86	2.12	2.46
	Rb	0.70	0.81	1.85	2.15
	Cs	0.64	0.75	1.58	1.83
	Cu	1.36	1.57	7.00	8.12
	Ag	1.20	1.39	5.48	6.36
	Au	1.20	1.39	5.51	6.39
2	Be	1.93	2.23	14.14	16.41
	Mg	1.37	1.58	7.13	8.27
	Ca	1.11	1.28	4.68	5.43
	Sr	1.02	1.18	3.95	4.58
	Ba	0.98	1.13	3.65	4.24
	Zn	1.57	1.82	9.39	10.90
	Cd	1.40	1.62	7.46	8.66
3	Al	1.75	2.02	11.63	13.49
	Ga	1.65	1.91	10.35	12.01
	In	1.50	1.74	8.60	9.98
4	Pb	1.57	1.82	9.37	10.87
	Sn(<i>w</i>)	1.62	1.88	10.03	11.64

Gas de electrones en tres dimensiones

Potencial químico

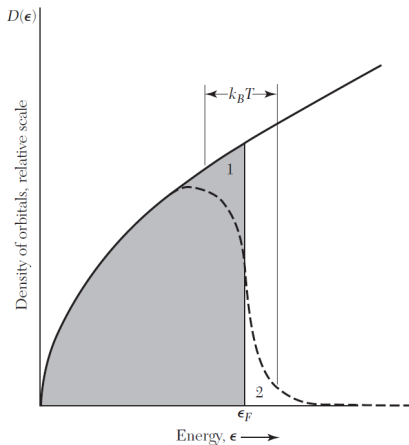
Obteniendo una expresión del **potencial químico** ($T > 0$) en función de T y las propiedades intrínsecas del sistema,³

$$N = \int_0^{\infty} D(\epsilon) f(\epsilon) d\epsilon,$$

$$\forall f(\epsilon) = \frac{1}{e^{(\epsilon-\mu)\beta} + 1},$$

en donde se considera que $\forall T$, $T \ll T_F$, $D(\epsilon)_{T=0} \sim D(\epsilon)_{T>0}$, siendo que existen pequeñas diferencias en un rango $k_B T$, vecindad de μ , por tanto:

$$D(\epsilon) = \sum_{n=0}^{\infty} \left| \frac{d^n D(\epsilon)}{d\epsilon^n} \right|_{\mu} \frac{(\epsilon - \mu)^n}{n!}.$$



³Como la energía o temperatura de Fermi.

Gas de electrones en tres dimensiones

Potencial químico: Expansión de Sommerfeld

Sustituyendo la expresión propuesta de $D(\epsilon)$ en la integral de N , se obtiene la **expansión de Sommerfeld**,

$$N = \int_0^\mu D(\epsilon) d\epsilon + \sum_{n=1}^{\infty} (k_B T)^{2n} a_n \left| \frac{d^{2n-1} D(\epsilon)}{d\epsilon^{2n-1}} \right|_\mu, \quad 4$$
$$N = \int_0^\mu D(\epsilon) d\epsilon + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \left| \frac{dD(\epsilon)}{d\epsilon} \right|_\mu + \dots$$
$$\dots + \frac{7\pi^4}{360} (k_B T)^4 \left| \frac{d^3 D(\epsilon)}{d\epsilon^3} \right|_\mu + O\left(\frac{k_B T}{\mu}\right)^6.$$

Para el caso en que $T \ll T_F$,⁵ el número de partículas puede ser aproximado hasta términos de T^2 ,

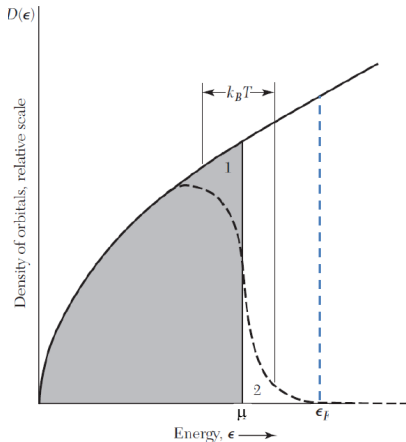
$$N = \int_0^\mu D(\epsilon) d\epsilon + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \left| \frac{dD(\epsilon)}{d\epsilon} \right|_\mu + O\left(\frac{k_B T}{\mu}\right)^4.$$

⁴En donde a_n son ctes. dimensionales del orden de la unidad.

⁵Situación que siempre se cumple en los metales.

Gas de electrones en tres dimensiones

Potencial químico: Expansión de Sommerfeld



Debido a que $D(\epsilon)_{T=0} \sim D(\epsilon)_{T>0}$, es posible aprox. la integral:

$$\int_0^{\mu} D(\epsilon) d\epsilon \approx \int_0^{\epsilon_F} D(\epsilon) d\epsilon + \dots \\ \dots + (\mu - \epsilon_F) D(\epsilon_F),$$

\therefore sust. en la expresión de N ,

$$N = \int_0^{\mu} D(\epsilon) d\epsilon + \dots \\ \dots + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 D'(\epsilon_F),$$

$$\Rightarrow N = \int_0^{\epsilon_F} D(\epsilon) d\epsilon + (\mu - \epsilon_F) D(\epsilon_F) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 D'(\epsilon_F).$$

Gas de electrones en tres dimensiones

Potencial químico: Expansión de Sommerfeld

De la expresión anterior,

$$N = \int_0^{\epsilon_F} D(\epsilon) d\epsilon + (\mu - \epsilon_F) D(\epsilon_F) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 D'(\epsilon_F),$$
$$\Rightarrow \mu = \epsilon_F - \frac{\pi^2}{6} (K_B T)^2 \frac{D'(\epsilon_F)}{D(\epsilon_F)},$$

en donde para el modelo del gas de Fermi se tiene:

$$D(\epsilon) = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \epsilon^{1/2} \quad \rightarrow \quad D'(\epsilon) = \frac{V}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \epsilon^{-1/2},$$

por tanto, para el potencial químico,

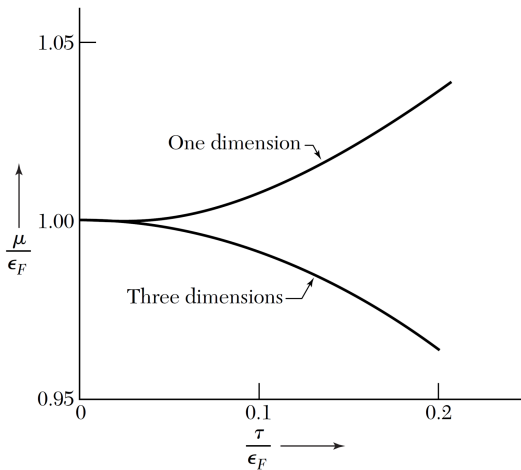
$$\mu = \epsilon_F - \frac{\pi^2}{6} (K_B T)^2 \frac{1}{2\epsilon_F} = \epsilon_F \left[1 - \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k_B T}{2\epsilon_F} \right)^2 \right],$$

lo cual corresponde a un corrimiento de 0.01% a $T = 300$ K.

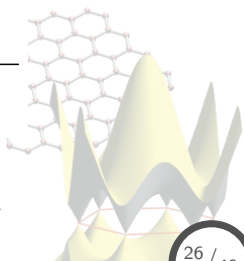
⁶Siendo: $N = \int_0^{\epsilon_F} D(\epsilon) d\epsilon$.

Gas de electrones en tres dimensiones

Potencial químico: Evolución respecto a T

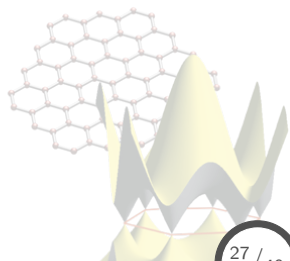


$$\mu = \epsilon_F \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{\tau}{\epsilon_F} \right)^2 \right] \quad \forall \quad \tau = k_B T.$$



Contenido: Tema 04

- 4. Modelo del gas de electrones libres
 - 4.1 Modelo del gas de Fermi
 - 4.2 Gas de electrones en tres dimensiones
 - 4.3 Capacidad calorífica, conductividad eléctrica y térmica del gas de electrones
 - 4.4 Movimiento en campos magnéticos: Efecto Hall



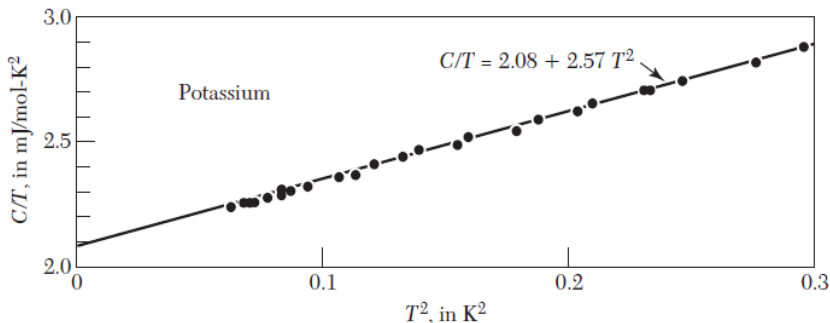
Capacidad calorífica del gas de electrones

Observaciones experimentales

A temperaturas muy por debajo de la temp. de Debye o de Fermi, el **calor específico** de los metales se puede expresar como:

$$C = C_{el} + C_{red} = \gamma T + AT^3,$$

en donde γ , el **parámetro de Sommerfeld**, y A son cantidades que caracterizan al metal.



Capacidad calorífica del gas de electrones

Resultados clásicos

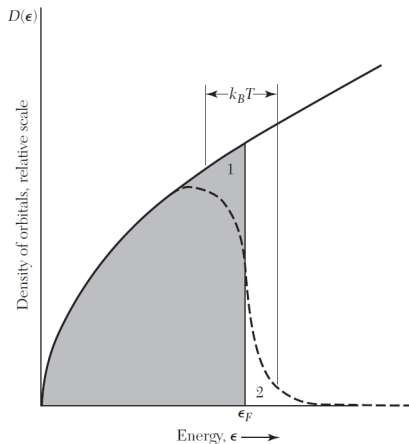
Considerando al **gas de electrones libres** como N partículas clásicas, el **calor específico** es $C_{el}^{clas} = 3Nk_B/2$, sin embargo, comparando con las observaciones experimentales:

- $C_{el} \propto T$ para temperaturas bajas ($T < T_F$).
- $C_{el}^{exp} \leq 0.01 C_{el}^{clas}$.

Para salvar tal discrepancia con el exp., se debe tomar en cuenta la naturaleza fermiónica de los e^- :

N_e = num. de e^- en un rango de energía $k_B T$ en la vecindad de ϵ_F excitados térmicamente,

$$\frac{N_e}{N} = \frac{k_B T}{k_B T_F} \Rightarrow N_e = N \frac{T}{T_F}.$$



Capacidad calorífica del gas de electrones

Análisis cualitativo del calor específico

Si se considera que cada e^- posee aprox. una energía $k_B T$, entonces la energía total será,

$$U \sim N_e k_B T = \left(N \frac{T}{T_F} \right) k_B T,$$

por tanto, el **calor específico** vendrá dado como,

$$C_{el} = \frac{\partial U}{\partial T} = 2Nk_B \frac{T}{T_F}.$$

Comparando el resultado recién obtenido con las observaciones experimentales,

- $C_{el} \propto T, \forall T < T_F$: tal relación lineal es obtenida.
- $C_{el}^{exp} \leq 0.01 C_{el}^{clas}$:

$$C_{el}^{clas} = \frac{3}{2} N k_B \quad \& \quad C_{el}^{quan} = 2Nk_B \frac{T}{T_F},$$
$$\Rightarrow C_{el}^{quan} \propto C_{el}^{clas} \frac{T}{T_F} = C_{el}^{clas} \frac{10^2}{10^4} = 0.01 C_{el}^{clas} = C_{el}^{exp}.$$

Capacidad calorífica del gas de electrones

Análisis cuantitativo del calor específico

Calculando primero la **energía electrónica** del gas de Fermi:

$$T = 0 : U(0) = \int_0^{\epsilon_F} \epsilon D(\epsilon) d\epsilon,$$

$$T > 0 : U(T) = \int_0^{\infty} \epsilon D(\epsilon) f(\epsilon, T) d\epsilon,$$

analizando con lo anterior el **cambio de energía** debido a la temperatura: $\Delta U = U(T) - U(0)$,

$$\begin{aligned} \Delta U &= \int_0^{\infty} \epsilon D(\epsilon) f(\epsilon, T) d\epsilon - \int_0^{\epsilon_F} \epsilon D(\epsilon) d\epsilon, \\ &= \int_0^{\epsilon_F} \epsilon D(\epsilon) f(\epsilon, T) d\epsilon - \int_0^{\epsilon_F} \epsilon D(\epsilon) d\epsilon + \int_{\epsilon_F}^{\infty} \epsilon D(\epsilon) f(\epsilon, T) d\epsilon, \\ &= - \int_0^{\epsilon_F} \epsilon D(\epsilon) [1 - f(\epsilon, T)] d\epsilon + \int_{\epsilon_F}^{\infty} \epsilon D(\epsilon) f(\epsilon, T) d\epsilon. \end{aligned}$$

Capacidad calorífica del gas de electrones

Análisis cuantitativo del calor específico

Por otro lado, se sabe:

$$N = \int_0^{\epsilon_F} D(\epsilon) d\epsilon = \int_0^{\infty} D(\epsilon) f(\epsilon, T) d\epsilon = \left[\int_0^{\epsilon_F} + \int_{\epsilon_F}^{\infty} \right] D(\epsilon) f(\epsilon, T) d\epsilon,$$

multiplicando por ϵ_F ambas expresiones,

$$\int_0^{\epsilon_F} \epsilon_F D(\epsilon) d\epsilon = \left[\int_0^{\epsilon_F} + \int_{\epsilon_F}^{\infty} \right] \epsilon_F D(\epsilon) f(\epsilon, T) d\epsilon,$$
$$\Rightarrow - \int_{\epsilon_F}^{\infty} \epsilon_F D(\epsilon) f(\epsilon, T) d\epsilon + \int_0^{\epsilon_F} \epsilon_F D(\epsilon) [1 - f(\epsilon, T)] d\epsilon = 0.$$

Relacionando la expresión anterior con ΔU , se tiene:

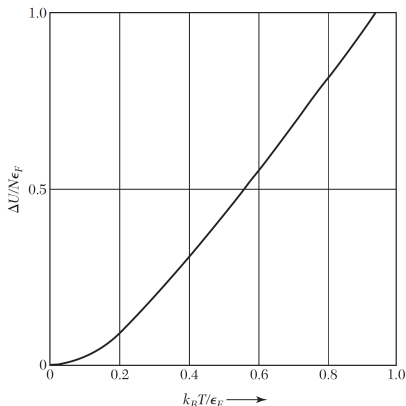
$$\Delta U = - \int_0^{\epsilon_F} \epsilon D(\epsilon) [1 - f(\epsilon, T)] d\epsilon + \int_{\epsilon_F}^{\infty} \epsilon D(\epsilon) f(\epsilon, T) d\epsilon,$$
$$\Delta U = \int_0^{\epsilon_F} (\epsilon_F - \epsilon) D(\epsilon) [1 - f(\epsilon, T)] d\epsilon + \int_{\epsilon_F}^{\infty} (\epsilon - \epsilon_F) D(\epsilon) f(\epsilon, T) d\epsilon.$$

Capacidad calorífica del gas de electrones

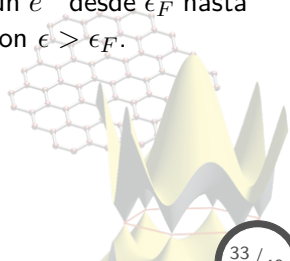
Análisis cuantitativo del calor específico

Del cambio de energía:

$$\Delta U = \int_0^{\epsilon_F} (\epsilon_F - \epsilon) D(\epsilon) [1 - f(\epsilon, T)] d\epsilon + \int_{\epsilon_F}^{\infty} (\epsilon - \epsilon_F) D(\epsilon) f(\epsilon, T) d\epsilon,$$



- **1^a integral:** Energía necesaria para llevar un e^- hasta ϵ_F desde un orbital con $\epsilon < \epsilon_F$.
- **2^a integral:** Energía necesaria para llevar un e^- desde ϵ_F hasta un orbital con $\epsilon > \epsilon_F$.



Capacidad calorífica del gas de electrones

Análisis cuantitativo del calor específico

De la expresión obtenida anteriormente:

$$\Delta U = \int_0^{\epsilon_F} (\epsilon_F - \epsilon) D(\epsilon) [1 - f(\epsilon, T)] d\epsilon + \int_{\epsilon_F}^{\infty} (\epsilon - \epsilon_F) D(\epsilon) f(\epsilon, T) d\epsilon,$$

es posible calcular el **calor específico** C_{el} ,

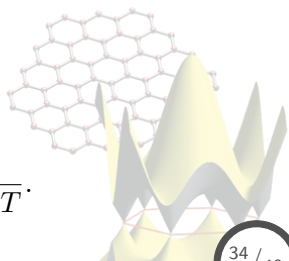
$$C_{el} = \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{\partial}{\partial T} (U_0 + \Delta U) = \frac{\partial \Delta U}{\partial T},$$

$$\therefore C_{el} = - \int_0^{\epsilon_F} (\epsilon_F - \epsilon) D(\epsilon) \frac{\partial f}{\partial T} d\epsilon + \int_{\epsilon_F}^{\infty} (\epsilon - \epsilon_F) D(\epsilon) \frac{\partial f}{\partial T} d\epsilon,$$

$$C_{el} = \int_0^{\infty} (\epsilon - \epsilon_F) D(\epsilon) \frac{\partial f}{\partial T} d\epsilon,$$

siendo $f(\epsilon, T)$ la distribución **Fermi-Dirac**:

$$f(\epsilon, T) = \frac{1}{e^{(\epsilon - \mu)\beta} + 1} \quad \forall \quad \beta = \frac{1}{k_B T}.$$



Capacidad calorífica del gas de electrones

Análisis cuantitativo del calor específico

Recordando la **expansión de Sommerfeld** para una función $H(\epsilon)$ que varía ligeramente,

$$\int_0^{\infty} H(\epsilon) f(\epsilon) d\epsilon = \int_0^{\mu} H(\epsilon) d\epsilon + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \left. \frac{\partial H}{\partial \epsilon} \right|_{\mu},$$

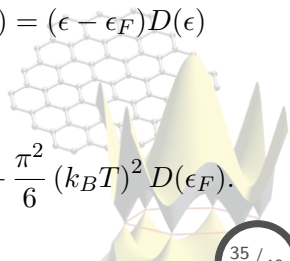
en donde:
$$\int_0^{\mu} H(\epsilon) d\epsilon \approx \int_0^{\epsilon_F} H(\epsilon) d\epsilon + (\mu - \epsilon_F) H(\epsilon_F),$$

siendo para este caso,

$$C_{el} = \frac{\partial}{\partial T} \int_0^{\infty} (\epsilon - \epsilon_F) D(\epsilon) f(\epsilon, T) d\epsilon \Rightarrow H(\epsilon) = (\epsilon - \epsilon_F) D(\epsilon)$$

por tanto, aplicando:

$$\int_0^{\infty} (\epsilon - \epsilon_F) D(\epsilon) f(\epsilon, T) d\epsilon \approx \int_0^{\epsilon_F} (\epsilon - \epsilon_F) D(\epsilon) d\epsilon + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 D(\epsilon_F).$$



Capacidad calorífica del gas de electrones

Constante de Sommerfeld

Calculando C_{el} :

$$\begin{aligned} C_{el} &= \frac{\partial}{\partial T} \int_0^{\infty} (\epsilon - \epsilon_F) D(\epsilon) f(\epsilon, T) d\epsilon, \\ &= \frac{\partial}{\partial T} \left[\int_0^{\epsilon_F} (\epsilon - \epsilon_F) D(\epsilon) d\epsilon + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 D(\epsilon_F) \right] = \frac{\pi^2}{3} k_B^2 T D(\epsilon_F), \end{aligned}$$

siendo que para el gas de Fermi,

$$D(\epsilon) = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \epsilon^{1/2} \quad \forall \quad = \frac{V}{3\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \epsilon^{3/2} \Rightarrow D(\epsilon) = \frac{3N}{2\epsilon},$$

por tanto,

$$\frac{C_{el}}{T} = \frac{\pi^2 N k_B}{2T_F} = \gamma \quad \forall \quad \epsilon_F = k_B T_F$$

obteniendo así una expresión para el **parámetro de Sommerfeld**.

Capacidad calorífica del gas de electrones

Constante de Sommerfeld

Table 2 Experimental and free electron values of electronic heat capacity constant γ of metals

(From compilations kindly furnished by N. Phillips and N. Pearlman. The thermal effective mass is defined by Eq. (38).)

Li	Be											B	C	N
1.63	0.17													
0.749	0.500													
2.18	0.34													
Na	Mg											Al	Si	P
1.38	1.3	Observed γ in $\text{mJ mol}^{-1} \text{K}^{-2}$.										1.35		
1.094	0.992	Calculated free electron γ in $\text{mJ mol}^{-1} \text{K}^{-2}$.										0.912		
1.26	1.3	$m_{\text{th}}/m = (\text{observed } \gamma)/(\text{free electron } \gamma)$.										1.48		
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn(γ)	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As
2.08	2.9	10.7	3.35	9.26	1.40	9.20	4.98	4.73	7.02	0.695	0.64	0.596		0.19
1.668	1.511									0.505	0.753	1.025		
1.25	1.9									1.38	0.85	0.58		
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn ^(w)	Sb
2.41	3.6	10.2	2.80	7.79	2.0	—	3.3	4.9	9.42	0.646	0.688	1.69	1.78	0.11
1.911	1.790									0.645	0.948	1.233	1.410	
1.26	2.0									1.00	0.73	1.37	1.26	
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg(α)	Tl	Pb	Bi
3.20	2.7	10.	2.16	5.9	1.3	2.3	2.4	3.1	6.8	0.729	1.79	1.47	2.98	0.008
2.238	1.937									0.642	0.952	1.29	1.509	
1.43	1.4									1.14	1.88	1.14	1.97	

Conductividad eléctrica y ley de Ohm

Cálculo de la conductividad eléctrica

En un campo electromagnético, la fuerza que es ejercida en un electrón de carga $-e$ es:

$$\mathbf{F} = -e [\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}],$$

por Newton, para un gas de Fermi, esa fuerza está dada como:

$$\mathbf{F} = \frac{d\mathbf{p}}{dt} \quad \forall \quad \mathbf{p} = m\mathbf{v} = \hbar\mathbf{k},$$

por tanto,

$$\begin{aligned} \hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} &= -e\mathbf{E} \quad \forall \quad \mathbf{B} = 0, \\ \Rightarrow d\mathbf{k} &= -\frac{e}{\hbar} \mathbf{E} dt, \end{aligned}$$

integrando la ec. anterior, y considerando $\mathbf{E} \neq \mathbf{E}(t)$,

$$\int_{\mathbf{k}(0)}^{\mathbf{k}(t)} d\mathbf{k} = -\frac{e}{\hbar} \mathbf{E} \int_0^t dt,$$

$$\Rightarrow \mathbf{k}(t) - \mathbf{k}(0) = \Delta\mathbf{k} = -\frac{e}{\hbar} \mathbf{E} t,$$

en donde la expresión de $\Delta\mathbf{k}$ refleja la naturaleza de un proceso de **dispersión** de electrones.

Además, se tiene para $\Delta\mathbf{k}$:

$$\hbar\Delta\mathbf{k} = m\Delta\mathbf{v},$$

$$\Rightarrow \Delta\mathbf{v} = -\frac{e}{m} \mathbf{E} t.$$

Conductividad eléctrica y ley de Ohm

Conductividad eléctrica y Ley de Ohm

La cantidad $\Delta \mathbf{v}$ se puede relacionar con el cambio de velocidad que sufre un e^- entre dos colisiones, caracterizadas por:

$\tau \rightarrow$ **tiempo de relajación**,

$l \rightarrow$ **recorrido libre medio**,

tales efectos dispersivos tienen su origen en:

- Imperfecciones de la red.
- Impurezas.
- Fonones.

Considerando que,

$$\Delta \mathbf{v} = \mathbf{v}(\tau) - \mathbf{v}(0),$$

$$\Rightarrow \mathbf{v} = -\frac{e}{m} \mathbf{E} \tau \quad \forall \quad \mathbf{v}(0) = 0.$$

Ahora, por otro lado, la **densidad de corriente** se define como,

$$\mathbf{J} = Nq\mathbf{v},$$

$$\Rightarrow \mathbf{J} = \left(\frac{Ne^2\tau}{m} \right) \mathbf{E},$$

lo cual corresponde a la **ley de Ohm**: $\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}$, en donde σ representa la **conductividad eléctrica** del sistema:

$$\sigma = \frac{Ne^2\tau}{m}.$$

Conductividad eléctrica y ley de Ohm

Resistividad eléctrica

La **resistividad eléctrica** se define:

$$\rho = \frac{1}{\sigma} \Rightarrow \rho = \frac{m}{Ne^2\tau},$$

teniendo diferentes contribuciones,

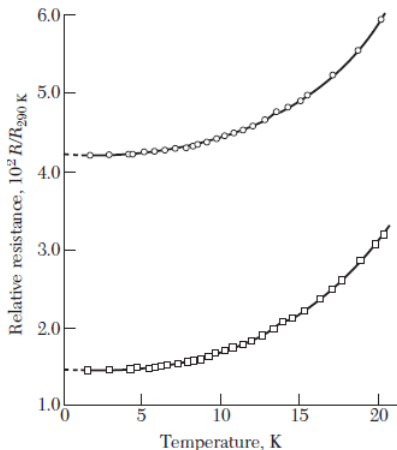
$$\rho = \rho_i + \rho_L,$$

ρ_i : Dispersión debida a **imperfecciones** en la red,

ρ_L : Dispersión debida a **fonones** térmicos.

Analizando los diferentes límites de T , se tiene:

$$\lim_{T \rightarrow 0} \rho = \rho_i(0) \leftarrow \text{res. residual},$$



si $T > \theta_D \Rightarrow \rho \propto T$,

por tanto en ese rango ρ_L es dominante.

Conductividad eléctrica y ley de Ohm

Datos de conductividad y resistividad eléctrica

Table 3 Electrical conductivity and resistivity of metals at 295 K
(Resistivity values as given by G. T. Meaden, *Electrical resistance of metals*, Plenum, 1965; residual resistivities have been subtracted.)

Li	Be											B	C	N	O	F	Ne	
1.07	3.08																	
9.32	3.25																	
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar	
2.11	2.33	Conductivity in units of 10^5 (ohm-cm) ⁻¹ .										3.65						
4.75	4.30	Resistivity in units of 10^{-8} ohm-cm.										2.74						
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr	
1.39	2.78	0.21	0.23	0.50	0.78	0.072	1.02	1.72	1.43	5.88	1.69	0.67						
7.19	3.6	46.8	43.1	19.9	12.9	139.	9.8	5.8	7.0	1.70	5.92	14.85						
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn ^(w)	Sb	Te	I	Xe	
0.80	0.47	0.17	0.24	0.69	1.89	~0.7	1.35	2.08	0.95	6.21	1.38	1.14	0.91	0.24				
12.5	21.5	58.5	42.4	14.5	5.3	~14.	7.4	4.8	10.5	1.61	7.27	8.75	11.0	41.3				
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg ^(iq)	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	
0.50	0.26	0.13	0.33	0.76	1.89	0.54	1.10	1.96	0.96	4.55	0.10	0.61	0.48	0.086	0.22			
20.0	39.	79.	30.6	13.1	5.3	18.6	9.1	5.1	10.4	2.20	95.9	16.4	21.0	116.	46.			
Fr	Ra	Ac	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu		
			0.12	0.15	0.17		0.10	0.11	0.070	0.090	0.11	0.13	0.12	0.16	0.38	0.19		
			81.	67.	59.		99.	89.	134.	111.	90.0	77.7	81.	62.	26.4	53.		
			Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr		
			0.66		0.39	0.085	0.070											
			15.2		25.7	118.	143.											

Conductividad térmica

Conductividad térmica del gas de electrones

De la teoría cinética de gases, se tiene que la **conductividad térmica** de un gas de partículas desplazándose a una vel. v , con un camino libre medio l es,

$$K = \frac{1}{3}Cvl \quad \forall \quad C = \text{calor específico,}$$

aplicando para el **gas de electrones libres** se tiene:

$$C_{el} = \frac{\pi^2}{3}k_B^2D(\epsilon_F)T \quad \forall \quad D(\epsilon_F) = \frac{3N}{2\epsilon_F} \quad \& \quad \epsilon_F = \frac{1}{2}mv_F^2,$$

por tanto, la conductividad térmica del **gas de electrones** es:

$$K_{el} = \left(\frac{\pi^2}{3m} N k_B^2 \tau \right) T \Rightarrow K_{el} \propto T.$$

Comparando con la **conductividad térmica fonónica**, se tiene:

- $K_{el} > K_{phon}$ en metales puros ($\forall T$),
- $K_{el} \approx K_{phon}$ en metales impuros o aleaciones desordenadas.

Conductividad térmica

Conductividad térmica del gas de electrones

Comparando las diferentes conductividades en un gas de electrones (eléctrica y térmica) se llega a la **ley de Wiedemann-Franz**:

$$\frac{K}{\sigma} = \frac{\pi^2 N k_B^2 \tau T / 3m}{N e^2 \tau / m} = \frac{1}{3} \left(\frac{\pi k_B}{e} \right)^2 T,$$

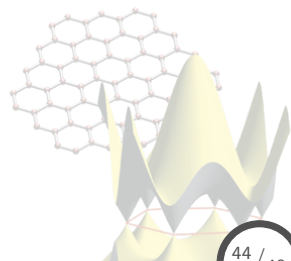
teniendo el **número de Lorentz**, el cual es independiente del material:

$$\Rightarrow L = \frac{K}{\sigma T} = \frac{1}{3} \left(\frac{\pi k_B}{e} \right)^2 \approx 2.45 \times 10^{-8} \text{ watt-ohm/K}^2.$$

$L \times 10^8 \text{ watt-ohm/deg}^2$			$L \times 10^8 \text{ watt-ohm/deg}^2$		
Metal	0°C	100°C	Metal	0°C	100°C
Ag	2.31	2.37	Pb	2.47	2.56
Au	2.35	2.40	Pt	2.51	2.60
Cd	2.42	2.43	Su	2.52	2.49
Cu	2.23	2.33	W	3.04	3.20
Mo	2.61	2.79	Zn	2.31	2.33

Contenido: Tema 04

- 4. Modelo del gas de electrones libres
 - 4.1 Modelo del gas de Fermi
 - 4.2 Gas de electrones en tres dimensiones
 - 4.3 Capacidad calorífica, conductividad eléctrica y térmica del gas de electrones
 - 4.4 Movimiento en campos magnéticos: Efecto Hall



Movimiento en campos magnéticos: Efecto Hall

Electrones en presencia de campos magnéticos

Para una partícula de masa m y carga $q = -e$, la ecuación de movimiento estará dada por:

$$\mathbf{F} = \frac{d\mathbf{p}}{dt} + \alpha\mathbf{v} = m \left(\frac{d}{dt} + \frac{1}{\tau} \right) \mathbf{v},$$

siendo $\alpha = m/\tau$ un término de **fricción** con origen en las colisiones de los electrones con imperfecciones o fonones.

Ahora, considerando que el movimiento del sistema en presencia de un campo magnético uniforme \mathbf{B} ,

$$\mathbf{F} = -e [\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}],$$

por tanto, la ec. de movimiento quedará como:

$$m \left(\frac{d}{dt} + \frac{1}{\tau} \right) \mathbf{v} = -e [\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}].$$

Considerando que los campos y la velocidad vienen dados por:

$$\mathbf{E} = (E_x, E_y, E_z), \quad \mathbf{B} = (0, 0, B), \\ \mathbf{v} = (v_x, v_y, v_z),$$

entonces,

$$m \left(\partial_t + \tau^{-1} \right) v_x = -e (E_x + v_y B), \\ m \left(\partial_t + \tau^{-1} \right) v_y = -e (E_y - v_x B), \\ m \left(\partial_t + \tau^{-1} \right) v_z = -e E_z.$$

Movimiento en campos magnéticos: Efecto Hall

Electrones en presencia de campos magnéticos

Para el caso particular de un **campo eléctrico estático**, se tendrá un estado estacionario $\therefore \mathbf{v} = \text{cte}$,

$$v_x = -\frac{e\tau}{m}E_x - \omega_c\tau v_y,$$

$$v_y = -\frac{e\tau}{m}E_y + \omega_c\tau v_x,$$

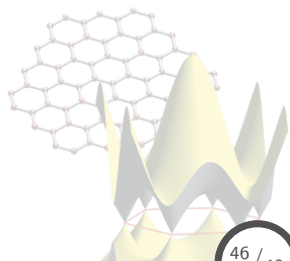
$$v_z = -\frac{e\tau}{m}E_z,$$

en donde $\omega_c = eB/m$ representa la **frecuencia de ciclotrón**.

Resolviendo el sistema anterior para v_x y v_y :

$$v_x = -\left(\frac{e\tau}{m}\right) \frac{E_x - \omega_c\tau E_y}{1 + \omega_c^2\tau^2},$$

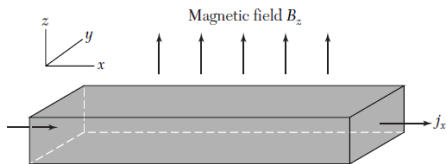
$$v_y = -\left(\frac{e\tau}{m}\right) \frac{E_y + \omega_c\tau E_x}{1 + \omega_c^2\tau^2}.$$



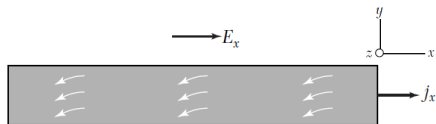
Movimiento en campos magnéticos: Efecto Hall

Campo Hall

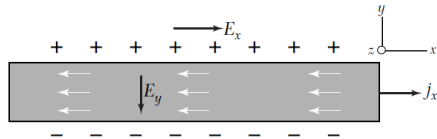
Considerando una barra infinita con flujo de electrones en \hat{i} , entonces existirá $\mathbf{J} = j_x \hat{i}$,



debido a \mathbf{B} (vía Lorentz) se tendrá una desviación en la trayectoria de los electrones:



Alcanzando el **est. estacionario** ($t \gg 0$), no habrá tal deflexión,



y al no tener donde fluir los e^- en $\hat{j} \Rightarrow v_y = 0$, por tanto de las ecs. de movimiento se obtiene:

$$E_y = -\omega_c \tau E_x = -\frac{eB\tau}{m} E_x,$$

es decir, la contribución de Lorentz se **contraresta** por un campo E_y , conocido como **campo de Hall**.

Movimiento en campos magnéticos: Efecto Hall

Coeficiente Hall

Por otro lado, definiendo el **coeficiente Hall**,

$$R_H = \frac{E_y}{j_x B} \quad \forall \quad j_x = nqv_x,$$

y recordando que $q = -e$, $v_x = (-e\tau/m)E_x$ con E_y como el **campo Hall**, entonces se tiene:

$$R_H = -\frac{1}{ne}.$$

Observaciones del coeficiente Hall:

- n y R_H son **inversamente** proporcionales.
- Es muy útil para medir la **concentración** de portadores de carga.

El signo del coeficiente Hall tiene un significado físico:

- $R_H < 0 \Rightarrow$ el portador es un **electrón**.
- $R_H > 0 \Rightarrow$ el portador es un **hueco**.

Movimiento en campos magnéticos: Efecto Hall

Coeficiente Hall

Table 4 Comparison of observed Hall coefficients with free electron theory

Metal	Method	Experimental R_H , in 10^{-24} CGS units	Assumed carriers per atom	Calculated $-1/nec$, in 10^{-24} CGS units
Li	conv.	-1.89	1 electron	-1.48
Na	helicon	-2.619	1 electron	-2.603
	conv.	-2.3		
K	helicon	-4.946	1 electron	-4.944
	conv.	-4.7		
Rb	conv.	-5.6	1 electron	-6.04
Cu	conv.	-0.6	1 electron	-0.82
Ag	conv.	-1.0	1 electron	-1.19
Au	conv.	-0.8	1 electron	-1.18
Be	conv.	+2.7	—	—
Mg	conv.	-0.92	—	—
Al	helicon	+1.136	1 hole	+1.135
In	helicon	+1.774	1 hole	+1.780
As	conv.	+50.	—	—
Sb	conv.	-22.	—	—
Bi	conv.	-6000.	—	—