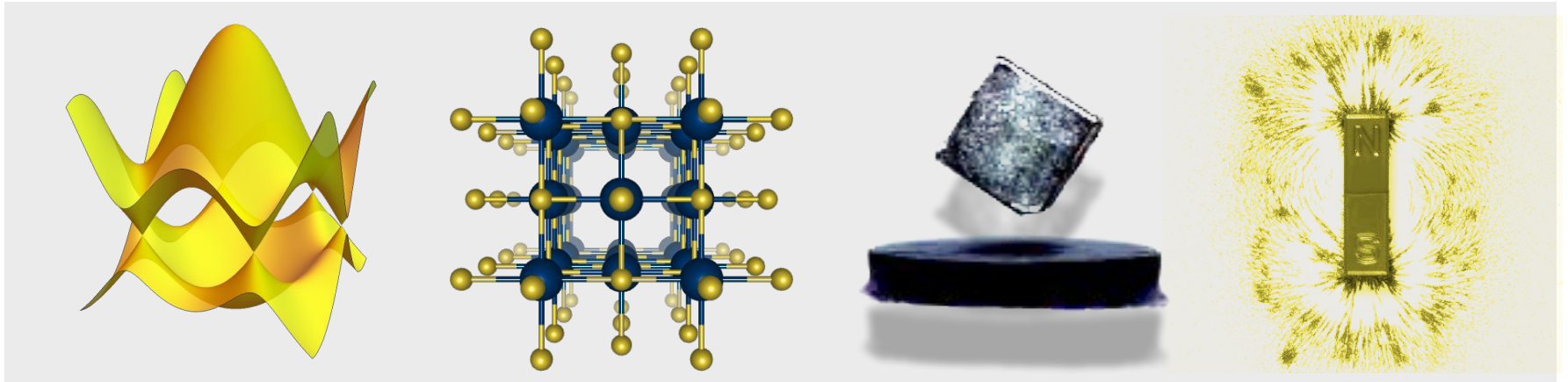


ESCOLA SÉRGIO MASCARENHAS DE FÍSICA DA MATÉRIA CONDENSADA

Aula 3 - 16 de Julho

Transporte Eletrônico



Assunto de hojas

1. O básico
2. Gás de elétrons clássicos (Drude)
3. Gás de elétrons quânticos (Sommerfeld)
4. Efeitos da rede cristalina (teoria de bandas)
5. Para lá das aproximações de relaxação e de elétron independente
6. Líquidos de Fermi
7. Alguns tópicos modernos

O básico

Diferenças entre isolantes e condutores.

	Isolantes	Condutores
Prop. transporte	Não conduzem	Conduzem bem
Prop. óticas	Frequentemente transparentes	Cor “metálica”
Prop. mecânicas		Frequentemente mais maleáveis

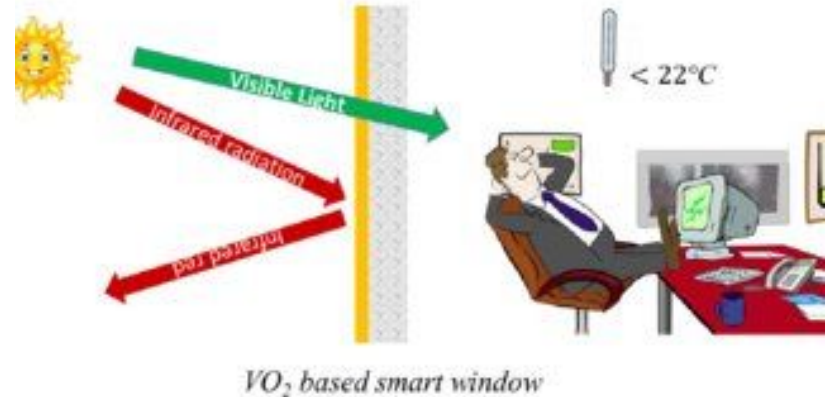
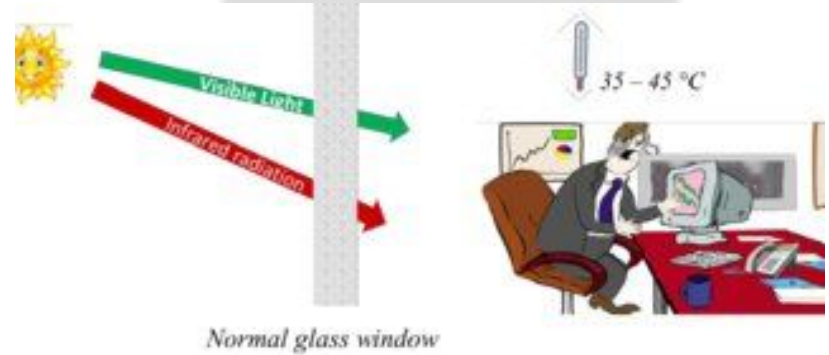
Estas diferenças resultam da estrutura cristalina e da química (Aula 1), que acabam determinando a estrutura eletrônica (Aula 2) que é quem “governa” o comportamento dos elétrons.



O básico

Algumas perguntas fundamentais:

- Que materiais conduzem corrente elétrica?
- Porque é que alguns materiais conduzem melhor do que outros?
- Qual a origem microscópica da resistência elétrica?
- Como se dá o transporte térmico?
- Como dependem esses transportes na temperatura do sistema?
- Como podemos manipular essas propriedades?

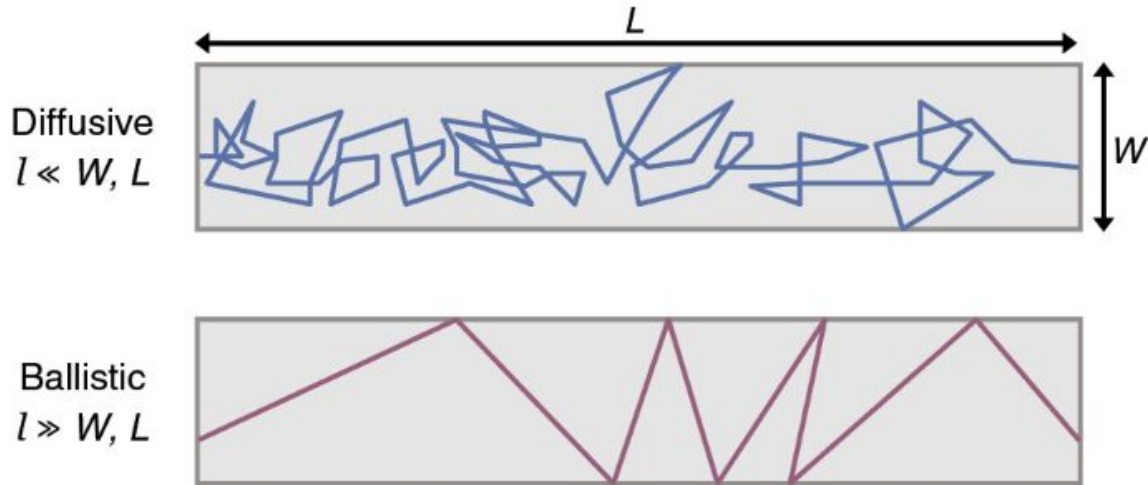


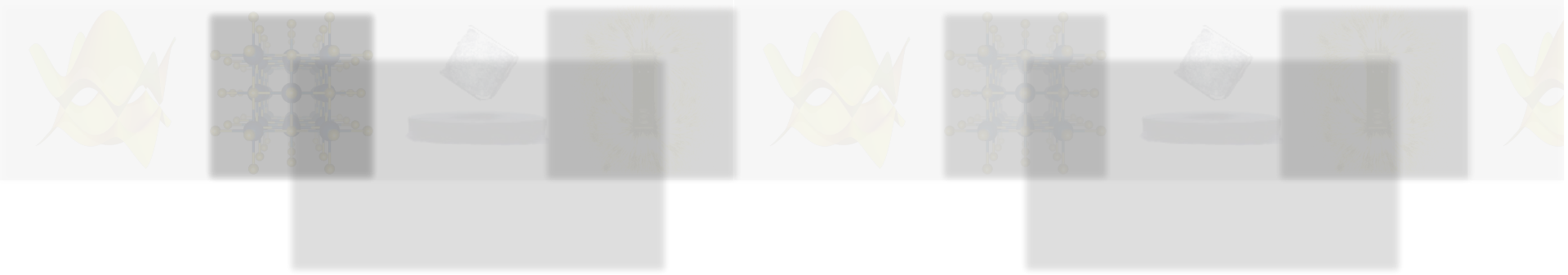
O básico

Dois regimes de transporte eletrónico distintos:

- Regime difusivo, $\ell \ll W, L$,
- Regime balístico, $\ell \gg W, L$,

onde ℓ é o livre caminho médio dos elétrons, W a largura do fio e L o comprimento.

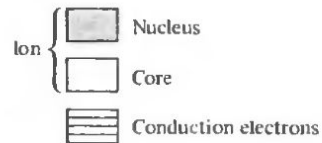
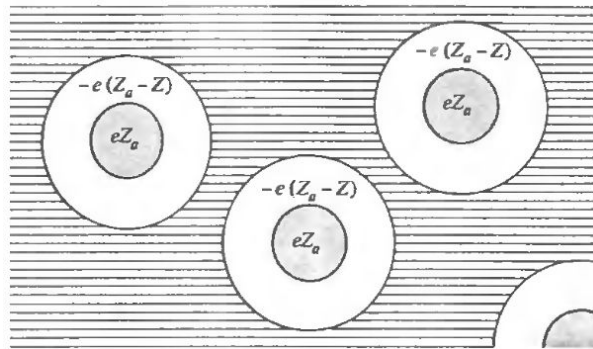




Teoria de Drude

Teoria de Drude

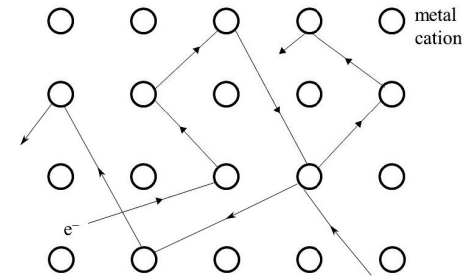
Para explicar a condução em metais Drude propôs que elétrons de valência se comportam como um gás clássico.



Gás de elétrons de Drude:

- Elétrons movem-se em linha recta.
- Colidem com os íons da rede cristalina.
- Mas íons estão deslocalizados (jellium).
- Não colidem com os outros elétrons (!).
- Após colisão elétron tem velocidade aleatória.
- Em média, cada elétron colidirá com um íon a cada tempo τ .

Drude Model (Free electron gas)



Velocidade média zero quando $\mathbf{E}=0 \Rightarrow \mathbf{J}=0$.

Teoria de Drude

Com campo elétrico constante, $\mathbf{E} \neq 0$, há uma força nos elétrons devida ao campo elétrico, $\mathbf{F} = -e \cdot \mathbf{E}$

$$m \frac{d\langle \mathbf{v} \rangle}{dt} = -m \frac{\langle \mathbf{v} \rangle}{\tau} + \mathbf{F}$$

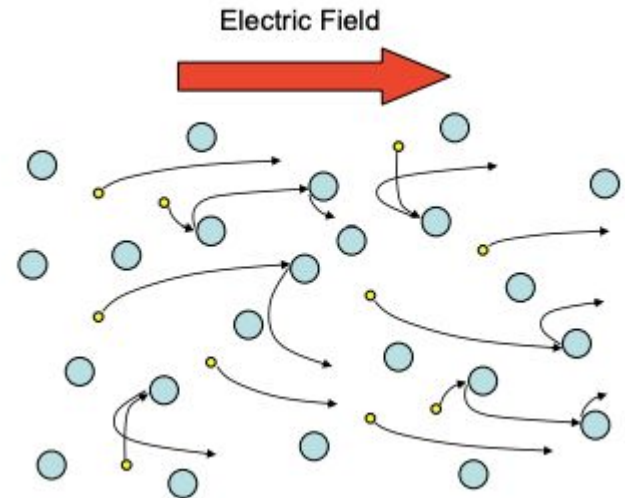
A corrente elétrica carregada por cada elétron é $\mathbf{j} = -e \cdot \mathbf{v}$.

Se a densidade de elétrons é $n = N/V$, então a corrente elétrica (média) é dada por $\langle \mathbf{j} \rangle = -n \cdot e \cdot \langle \mathbf{v} \rangle$. A corrente média pode ser então relacionada com o campo elétrico \mathbf{E}

$$\langle \mathbf{j} \rangle = \left(\frac{ne^2\tau}{m} \right) \mathbf{E}$$

que é essencialmente a lei de Ohm. A constante de proporcionalidade é chamada de condutividade, σ , e seu inverso é chamado de resistividade, ρ ,

$$\rho = \frac{1}{\sigma} = \frac{m}{ne^2\tau}$$



Nota: Corrente é dada por $I = j \cdot A$, a voltagem por $V = E/l$, e a resistência por $R = \rho \cdot l/A$.

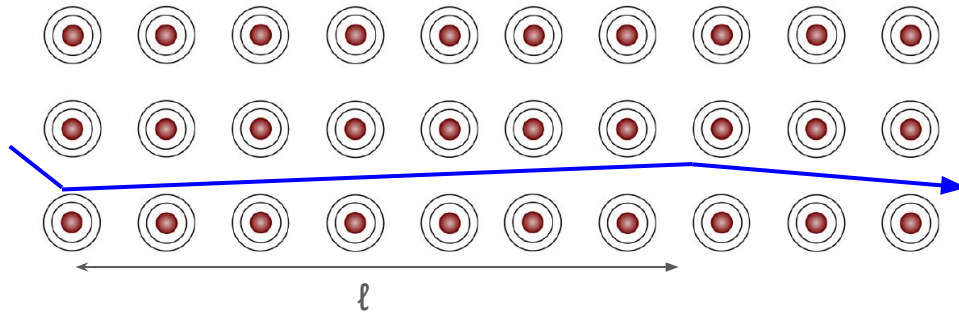
Teoria de Drude

O tempo médio de colisão τ é um parâmetro característico do material (em geral desconhecido).

Uma escala de comprimento característica de um material é o livre caminho médio, $\ell = v_0 \cdot \tau$, i.e. caminho médio que um elétron percorre entre colisões. Podemos estimá-lo

$$\frac{1}{2}mv_0^2 = \frac{3}{2}k_B T$$

Verificamos que ℓ é frequentemente muito maior do que a distância interatômica num cristal.



ELECTRICAL RESISTIVITIES OF SELECTED ELEMENTS^a

ELEMENT	77 K	273 K	373 K	$\frac{(\rho/T)_{373\text{ K}}}{(\rho/T)_{273\text{ K}}}$
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
Be		2.8	5.3	1.39
Mg	0.62	3.9	5.6	1.05

Estimamos que para Ag em $T=273\text{K}$ temos $\ell \sim 50\text{\AA}$, que é muito maior do que a distância interatômica $d \sim 1\text{\AA}$!!!

Não são os íons que espalham os elétrons!

Teoria de Drude

Medições experimentais da resistividade ρ a diferentes temperaturas sugerem que o tempo médio de colisão deve ser dependente da temperatura, T,

$$\tau(T) = \frac{m}{ne^2\rho(T)}$$

ELECTRICAL RESISTIVITIES OF SELECTED ELEMENTS^a

ELEMENT	77 K	273 K	373 K	$\frac{(\rho/T)_{373\text{ K}}}{(\rho/T)_{273\text{ K}}}$
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
Be		2.8	5.3	1.39
Mg	0.62	3.9	5.6	1.05

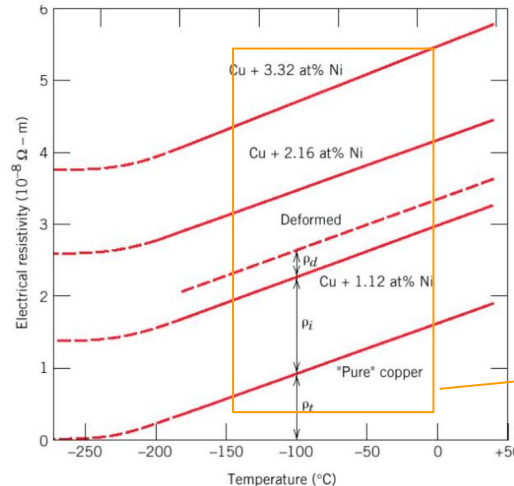
Teoria de Drude

Medições experimentais da resistividade ρ a diferentes temperaturas sugerem que o tempo médio de colisão deve ser dependente da temperatura, T ,

$$\tau(T) = \frac{m}{ne^2\rho(T)}$$

ELECTRICAL RESISTIVITIES OF SELECTED ELEMENTS^a

ELEMENT	77 K	273 K	373 K	$\frac{(\rho/T)_{373\text{ K}}}{(\rho/T)_{273\text{ K}}}$
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
Be		2.8	5.3	1.39
Mg	0.62	3.9	5.6	1.05



Em metais simples a variação de ρ em temperaturas não muito baixas parece ser linear em T ,

$$\rho(T) \propto T$$

Teoria de Drude

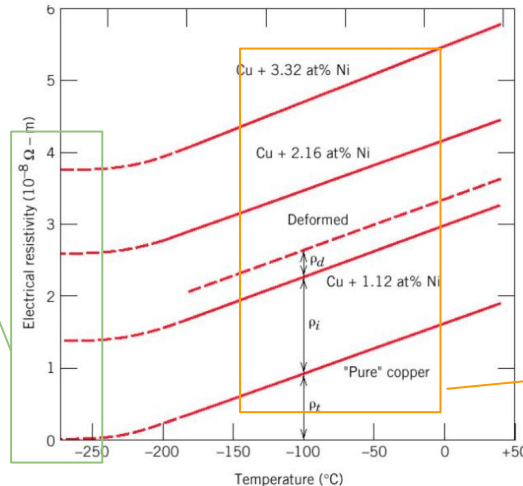
Medições experimentais da resistividade ρ a diferentes temperaturas sugerem que o tempo médio de colisão deve ser dependente da temperatura, T ,

$$\tau(T) = \frac{m}{ne^2\rho(T)}$$

Mais desordem parece aumentar o valor da resistividade no limite de temperatura zero, $\rho(T=0)$.

Colocando estas duas observações juntas

$$\rho(T) = \rho_0 + aT$$



ELECTRICAL RESISTIVITIES OF SELECTED ELEMENTS^a

ELEMENT	77 K	273 K	373 K	$\frac{(\rho/T)_{373\text{ K}}}{(\rho/T)_{273\text{ K}}}$
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
Be		2.8	5.3	1.39
Mg	0.62	3.9	5.6	1.05

Em metais simples a variação de ρ em temperaturas não muito baixas parece ser linear em T ,

$$\rho(T) \propto T$$

Teoria de Drude

Medições experimentais da resistividade ρ sugerem dependência na temperatura

$$\rho(T) = \rho_0 + aT$$

Quais fontes de espalhamento?

- Defeitos cristalinos (impurezas, vazios, etc.);
- Vibrações da rede cristalina (fónons);
- Interações elétron-elétron;

Vamos para já ignorar as interações elétron-elétron.

Concentração de defeitos deverá ser independente da temperatura. Associamos ρ_0 a defeitos cristalinos.

É razoável esperar que uma maior temperatura gere maior “agitação térmica” dos átomos do cristal. A resistividade devida aos fónons deverá ser responsável por pelo menos parte da dependência $\rho(T)$.

Teoria de Drude

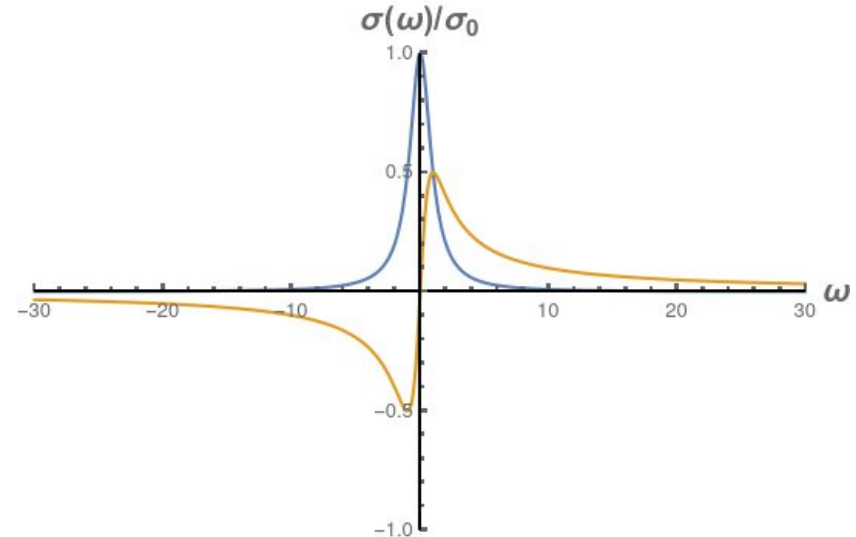
Podemos estender as derivações anteriores para o caso de um campo elétrico variável no tempo e no espaço (tensão AC). Para um campo respeitando $\lambda \gg \ell$, a corrente média será

$$\langle \mathbf{j} \rangle (\mathbf{r}, \omega) = \sigma(\omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega)$$

onde a condutividade será uma função complexa dependente da frequência

$$\sigma(\omega) = \frac{\sigma_0}{1 - i\omega\tau}, \quad \sigma_0 = \frac{ne^2\tau}{m}$$

Para frequências altas, corrente e campo estarão defasadas (e corrente atenuada).



Teoria de Drude

Usando as equações de Maxwell podemos derivar a equação de onda que governa a propagação de uma onda EMG num metal $\mathbf{E}(\mathbf{r},t) = \mathbf{E}(\mathbf{r}) \cdot e^{-i\omega t}$,

$$-\nabla^2 \mathbf{E} = \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon(\omega) \mathbf{E} \quad \text{onde} \quad \epsilon(\omega) = 1 + i \frac{4\pi\sigma(\omega)}{\omega}$$

é a função dielétrica.

Para frequências altas, $\omega \gg \tau$, podemos escrever

$$\epsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \quad \omega_p^2 = \frac{4\pi n e^2}{m}$$

onde ω_p é chamada de frequência de plasma. Dois casos qualitativamente distintos:

- Quando $\omega < \omega_p$ o campo elétrico decai exponencialmente dentro do metal. Metal é opaco.
- Quando $\omega > \omega_p$ o campo elétrico propaga-se no material. Metal torna-se transparente.

Teoria de Drude

A teoria de Drude permite também calcular a corrente térmica devida aos elétrons quando existe um gradiente de temperatura.

$$\langle \mathbf{j}^q \rangle = -\kappa \nabla T$$

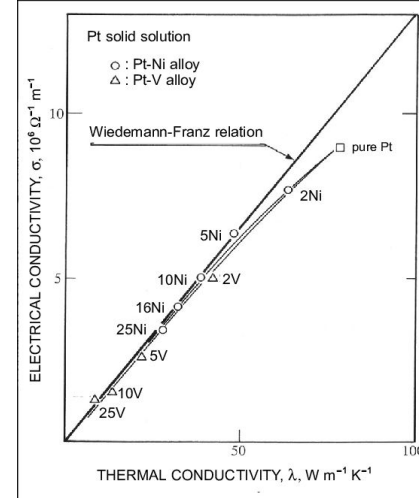
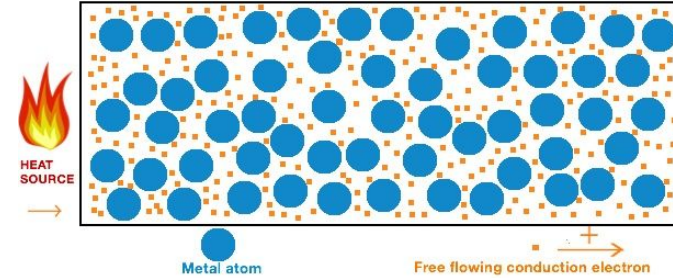
onde o factor de proporcionalidade é chamado de condutividade térmica. Drude obteve para a condutividade térmica

$$\kappa = \frac{1}{3} v^2 \tau c_v$$

onde c_v é o calor específico. Este resultado permitiu-lhe obter (com a ajuda de um erro) a lei de Wiedemann-Franz

$$\frac{\kappa}{\sigma} = \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k_b}{e} \right)^2 T$$

i.e. elétrons transportam carga e calor (de forma semelhante).



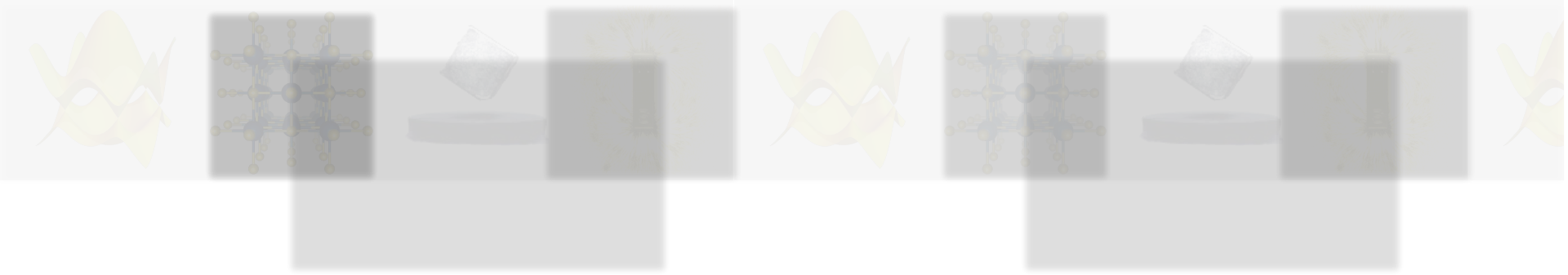
Teoria de Drude

Drude conseguiu clarificar muitos fenómenos:

- Obteve semi-quantitativamente a lei de Ohm;
- Estimou resistividades, coeficiente de Hall, magnetoresistencia;
- Descrição da condutividade elétrica AC;
- Descrição da condutividade térmica e lei de Wiedmann-Franz;

Mas várias coisas ficaram por explicar:

- Calor específico eletrónico muito errado ($3k_B/2$).
- Observação de coeficientes de Hall negativo em certos materiais.
- Porque alguns materiais são isolantes (mesmo tendo elétrons de valência).



Teoria de Sommerfeld

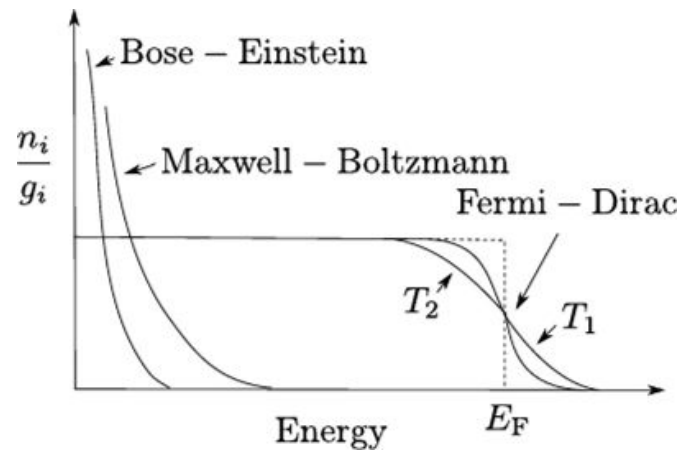
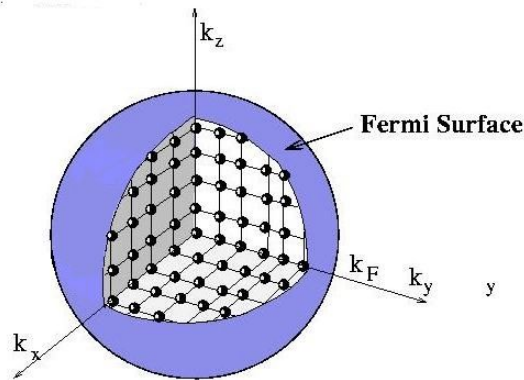
Teoria de Sommerfeld

A melhoria óbvia à teoria de Drude do gás clássico de elétrons, é considerar um gás quântico de elétrons. Foi isso que Sommerfeld fez.

Parte da equação de Schrodinger. Usa a distribuição de Fermi-Dirac (e não a de Maxwell-Boltzmann) para calcular grandezas estatísticas.

Elétrons ainda são independentes!

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



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

Teoria de Sommerfeld

Usando esta teoria obtemos a mesma condutividade térmica de antes. Mas como agora o calor específico (gás quântico de elétrons livres) é

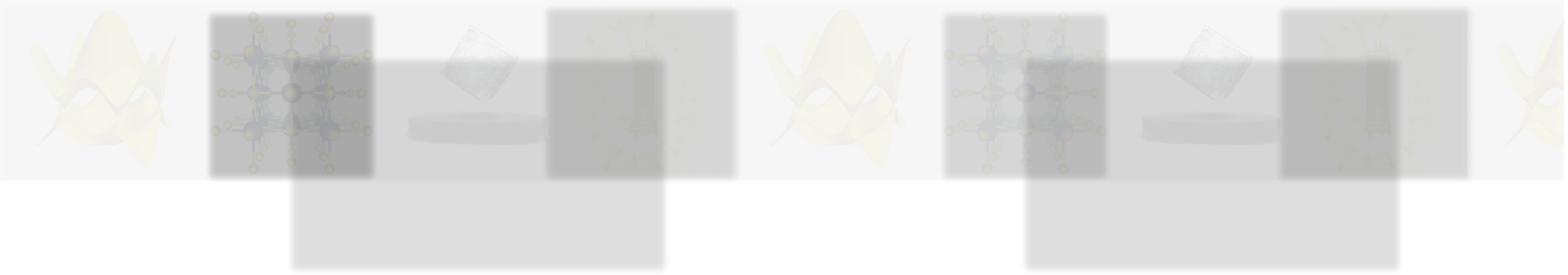
$$c_v = \frac{\pi^2}{2} \left(\frac{k_B T}{\mathcal{E}_F} \right) n k_B$$

(muito melhor do que o resultado clássico $c_v = 3 \cdot n \cdot k_B / 2$) conseguimos obter exatamente a lei de Wiedemann-Franz.

A condutividade DC e AC assim como o coeficiente de Hall e a magnetoresistência são os mesmos do caso de Drude.

Apesar dos sucessos face a Drude, a teoria de Sommerfeld continua com muitos dos problemas da de Drude.

- Coeficientes de Hall errados (negativo) em alguns materiais.
- Não explica porque é que o mean-free-path é tão longo (muitas distâncias interatômicas).
- Não explica porque alguns materiais são condutores, outros isolantes e outros semicondutores.



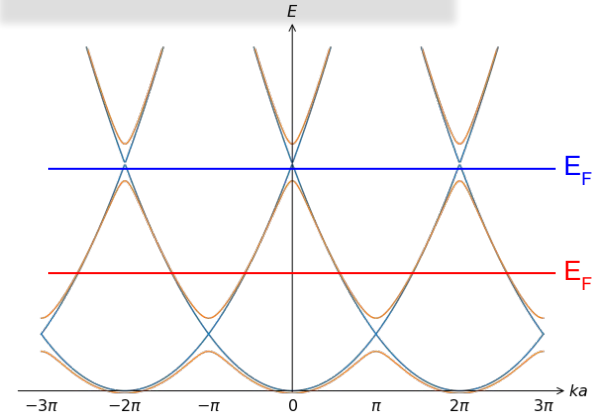
Teoria de Bandas

Teoria de Bandas

Tomamos agora em conta o potencial periódico dos íons da estrutura cristalina.

Elétrons quasi-livres: A abordagem mais simples é considerar um gás quântico de elétrons sujeito a um pequeno potencial perturbativo periódico no espaço, $V(r+G)=V(r)$.

Usando teoria de perturbações obtemos bandas de energia (separadas por gaps nos limites da zona de Brillouin).



Ainda assumindo que os elétrons não interagem, usamos o Princípio de Pauli para preencher os níveis de energia. Nível de Fermi no **meio da banda** caracteriza um **condutor**. Nível de Fermi **no gap** caracteriza um **isolante**.

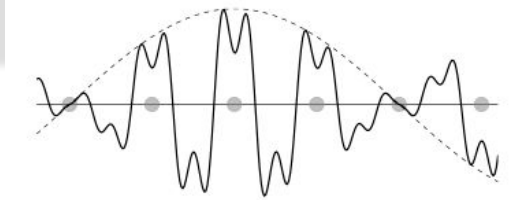
Daqui podemos logo perceber porque nem todos os materiais com elétrons de valência são condutores: densidade de elétrons é crucial.

Teoria de Bandas

Os auto-estados de um sistema periódico (i.e. com simetria de translação discreta) são ondas de Bloch

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

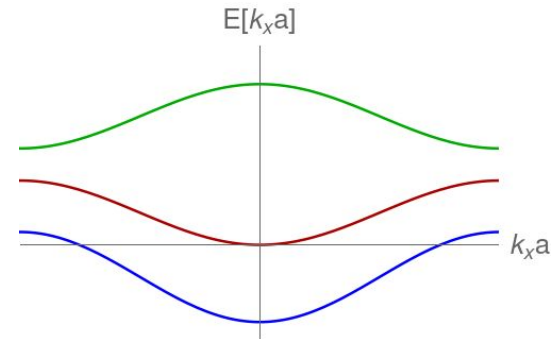
onde $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}+\mathbf{G}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ tem a periodicidade do potencial (i.e. rede cristalina).



Na Aula 2 viram que podemos usar *Linear Combinations of Atomic Orbitals* (LCAO) para refinar a aproximação do gás de elétrons livres com pequena perturbação periódica. As estruturas de bandas LCAO serão necessariamente mais complexas do que a anterior, resultando da acção combinada das simetrias da estrutura cristalina e das propriedades químicas dos elementos que compõem o material.

Simplificando... Sólido 1D:

- Distâncias inter-atômicas determinam larguras de banda.
- Química dos átomos (orbitais) define a posição em energia e curvatura das bandas.
- Quantidade de elétrons determina se isolante ou condutor.



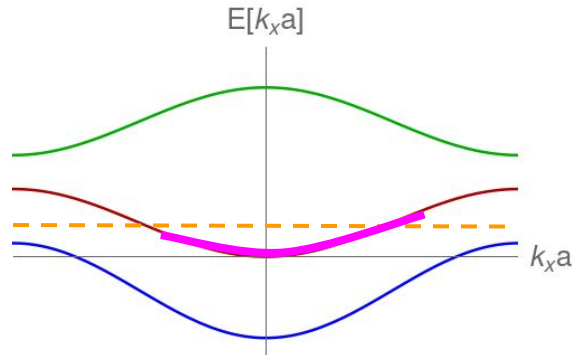
Teoria de Bandas

Mas porque é que ter o nível de Fermi no meio de uma banda caracteriza um condutor?
Alternativamente, porque um isolante/semicondutor tem o nível de Fermi no gap?

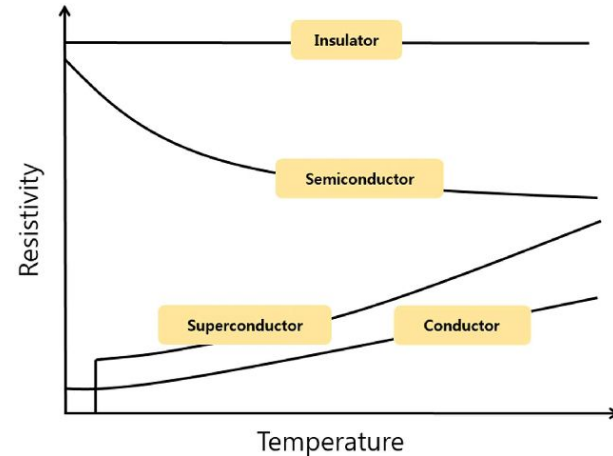
Velocidade de uma onda de Bloch

$$\mathbf{v}_n(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \mathcal{E}_n(\mathbf{k})$$

Aplicando (pequeno) campo elétrico e usando teoria de perturbações, verificamos que corrente não nula só se E_F no meio de uma banda.



Diferenças entre condutor, semicondutor e isolante

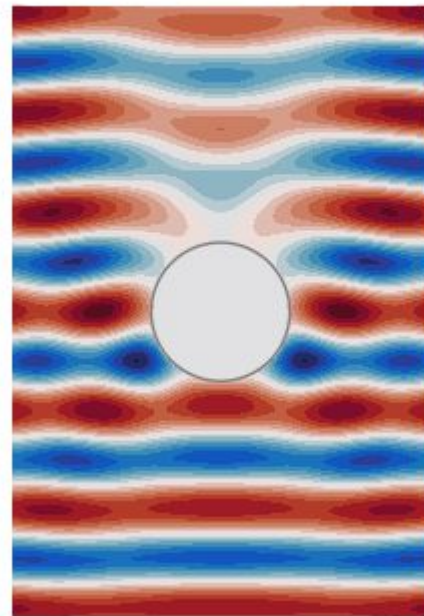


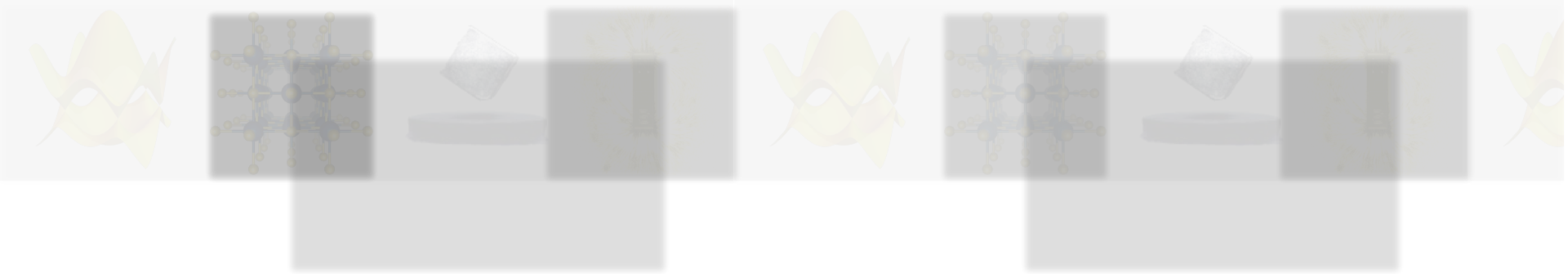
Teoria de Bandas

E onde aparece o espalhamento nesta teoria?

Os elétrons não são espalhados pelos íons, mas na verdade por falhas da rede cristalina, i.e. por defeitos na periodicidade do sistema (impurezas, ausência de átomos, átomos trocados, etc.). Estes defeitos perturbam a propagação das ondas de Bloch.

Mas a “big picture” é a mesma que Drude e Sommerfeld (esta teoria é essencialmente semi-clássica).





Para lá das aprox. de relaxação e de elétron independente

Para lá das aprox. de relaxação e de elétron independente

Para lá da aproximação de relaxação

É natural esperar que o espalhamento eletrónico não seja o mesmo para todos os elétrons. Afinal eles “vivem” em diferentes bandas de energia e em diferentes \mathbf{k} .

Podemos ter isso em conta, o que implicará que tenhamos que seguir a evolução no tempo da função de distribuição das velocidades e posições eletrónicas. Isso é tipicamente feito com a equação de transporte de Boltzmann

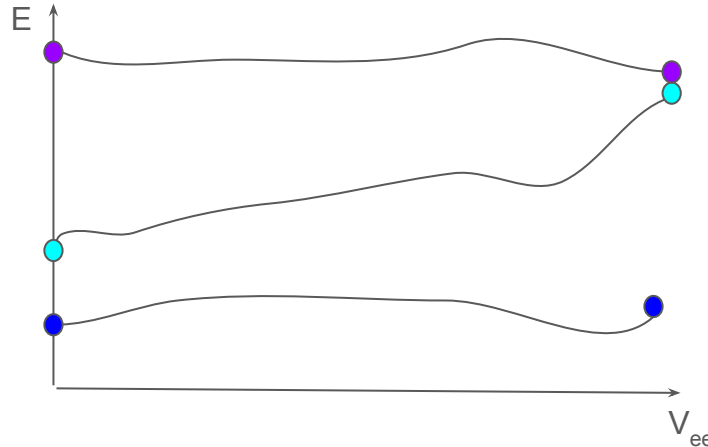
$$\frac{\partial g}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} g + \frac{1}{\hbar} \mathbf{F} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} g = \left(\frac{\partial g}{\partial t} \right)_{\text{col}}$$

Para lá das aprox. de relaxação e de elétron independente

Para lá da aproximação de elétron independente

Num metal as interações (efetivas) elétron-elétron são em princípio fracas devido ao “screening” (blindagem eletrónica).

Landau argumentou que se ligarmos lentamente a interação elétron-elétron, conseguiremos corresponder 1-para-1 cada um dos estados do sistema sem interações elétron-elétron e o sistema com interações eletrónicas. No entanto, os auto-estados terão propriedades (massa, etc.) e auto-energias renormalizadas.



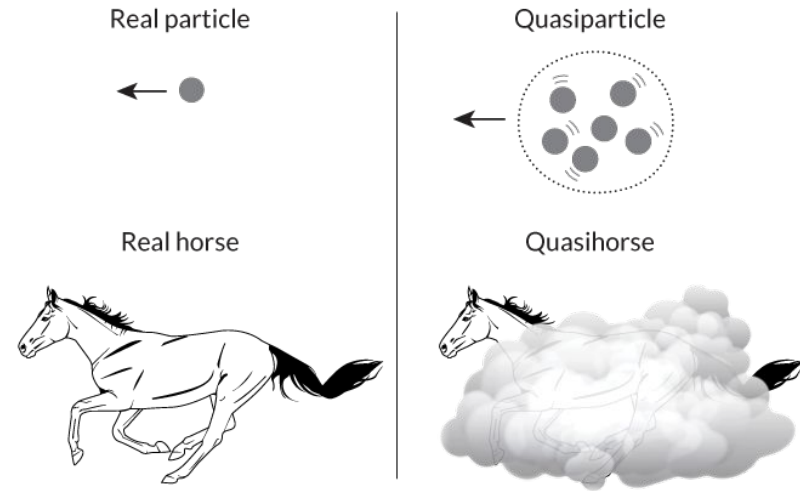
Para lá das aprox. de relaxação e de elétron independente

A teoria de Landau dos líquidos de Fermi diz que o sistema com interações elétron-elétron (não excessivamente fortes) terá características muito semelhantes ao sistema não-interagente.

As excitações de baixas energias serão muito semelhantes a partículas independentes (do gás de elétrons sem interações e-e).

Têm um tempo de vida finito (que decresce com a distância à energia de Fermi). Chamamos-lhes por isso “**quasi-partículas**”.

Estas têm propriedades “vestidas”/efetivas (como massa, momento magnético, etc.) diferentes das propriedades originais das partículas (no sistema sem interações).



Para lá das aprox. de relaxação e de elétron independente

Podemos mostrar que muito próximo de E_F as quasi-partículas quase não conseguem “colidir” com outras quasi-partículas, e por isso vivem longamente (tempo de vida tende a infinito quando E tende a E_F).

Para além disso, em baixas temperaturas, um quasi-elétron com uma energia apenas ligeiramente acima da energia de Fermi, tem um espalhamento (por outros elétrons) que depende de $1/\tau \propto T^2$.

Em resumo, a resistividade de um metal terá as seguintes contribuições

$$\rho(T) = \rho_0 + aT + bT^2$$

elétron-impurezas elétron-fónon elétron-elétron

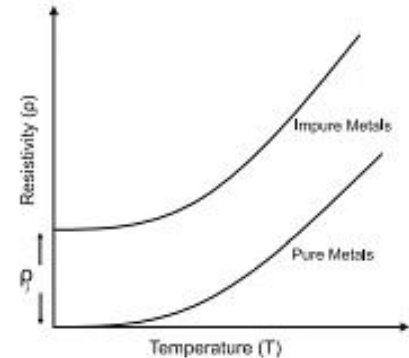
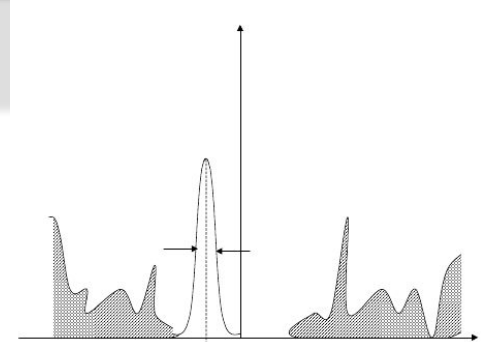
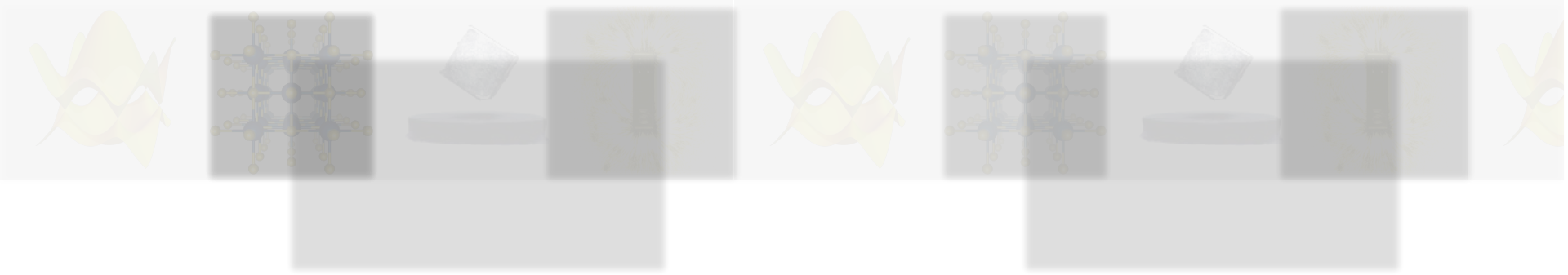


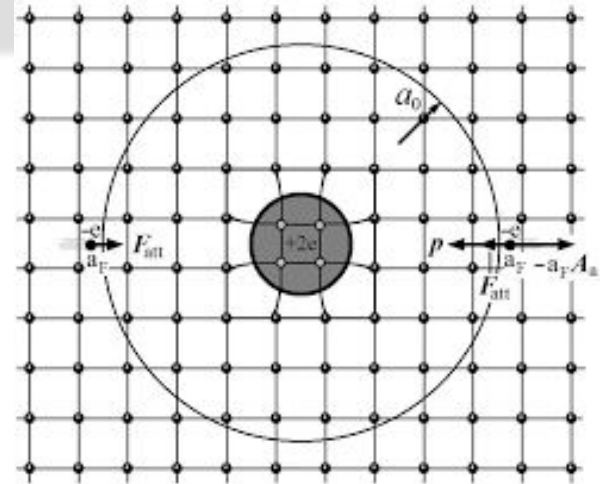
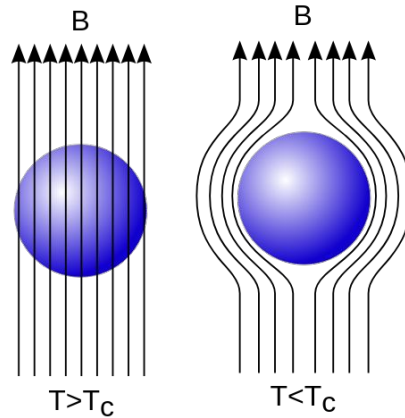
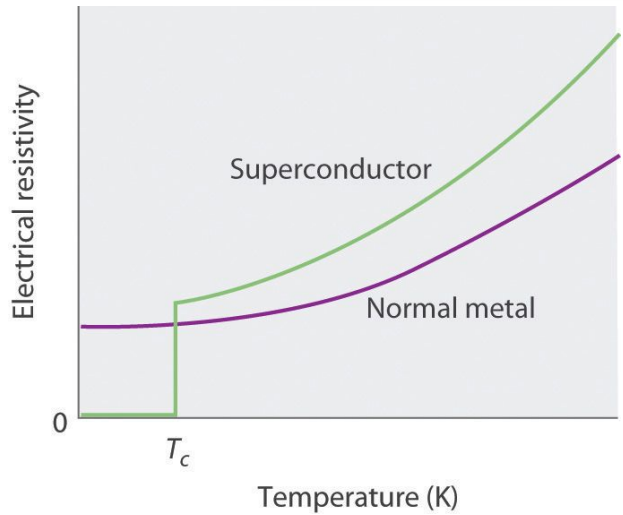
Figure 3.2: Variation of resistivity with temperature



Tópicos modernos

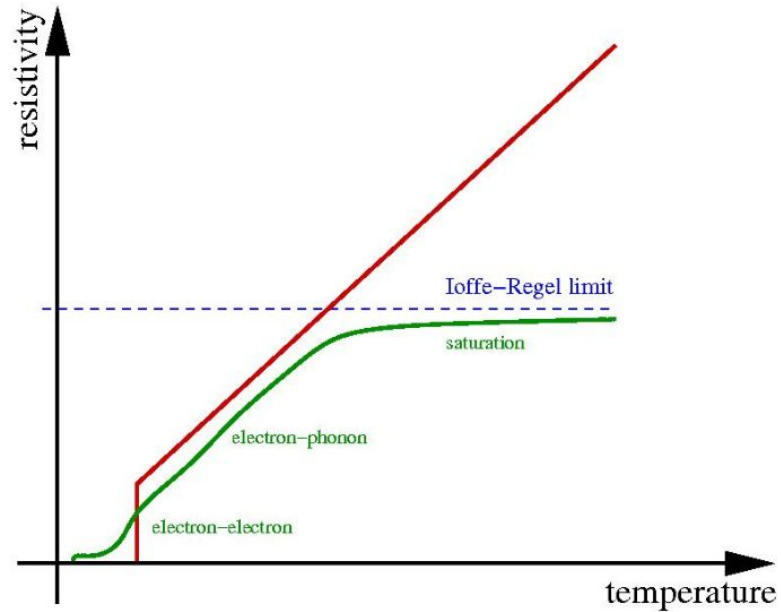
Tópicos modernos

Supercondutores



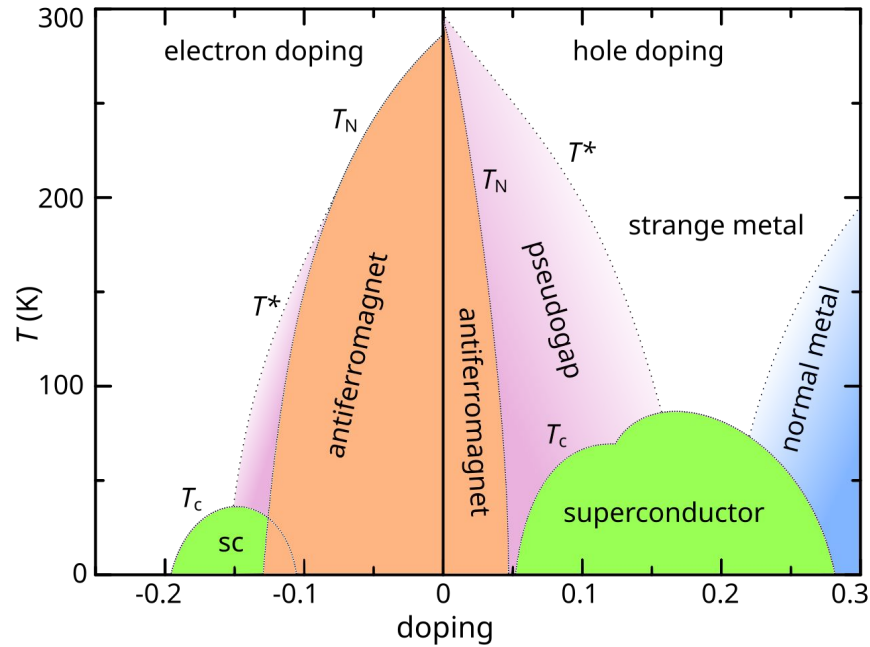
Tópicos modernos

Metais estranhos



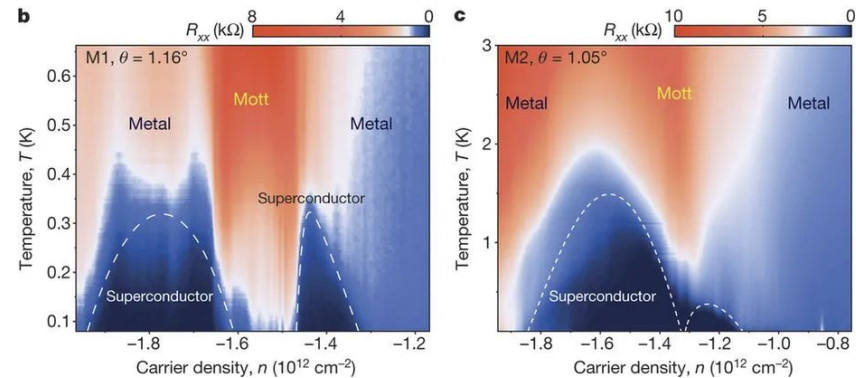
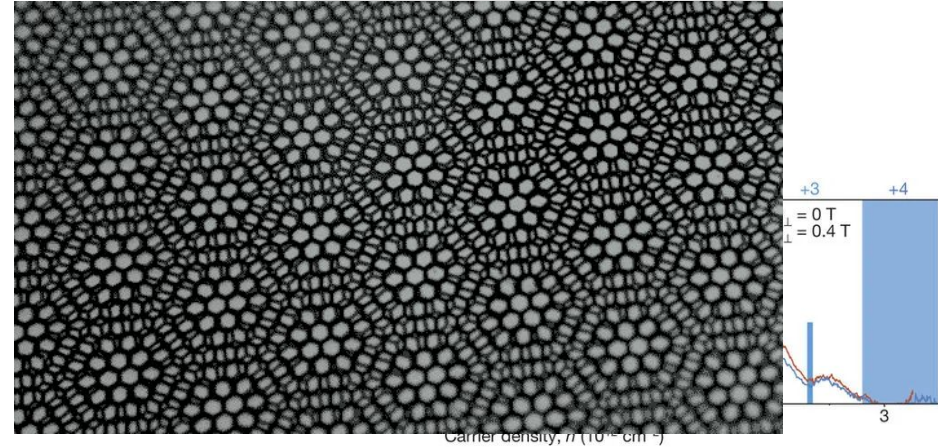
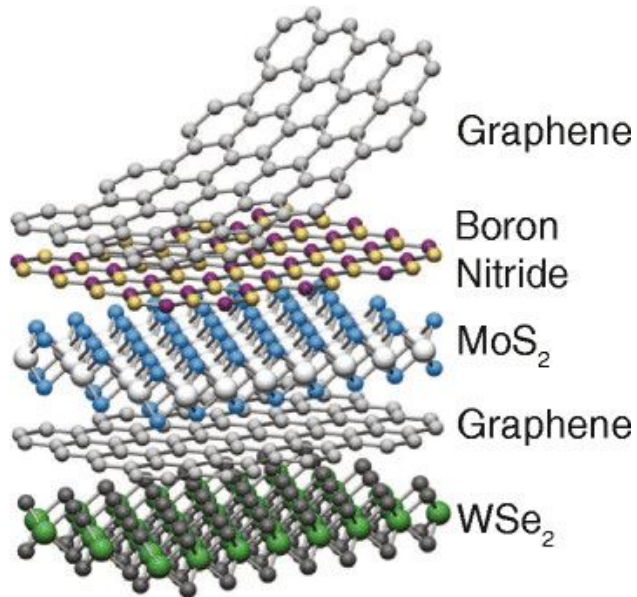
Tópicos modernos

Supercondutores não convencionais (exemplo dos óxidos de cobre)



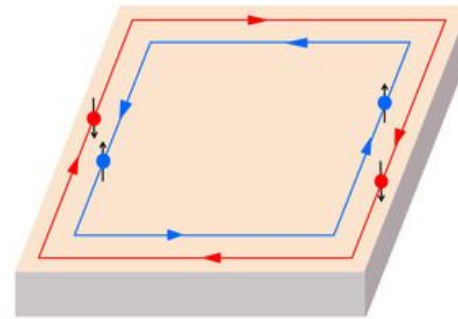
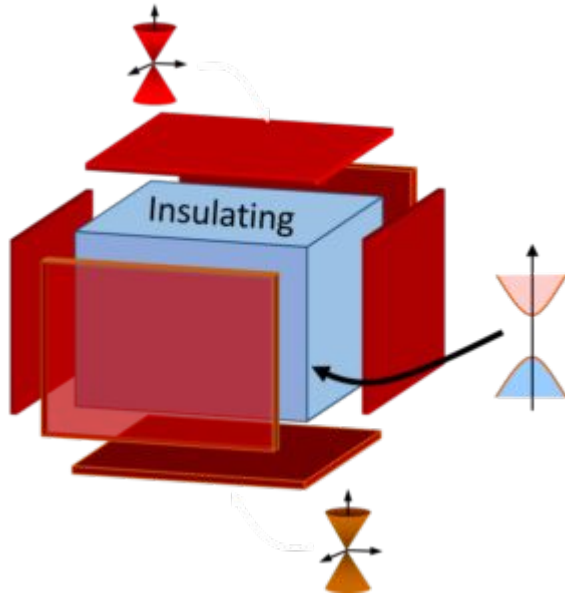
Tópicos modernos

Materiais 2D e heteroestruturas 2D

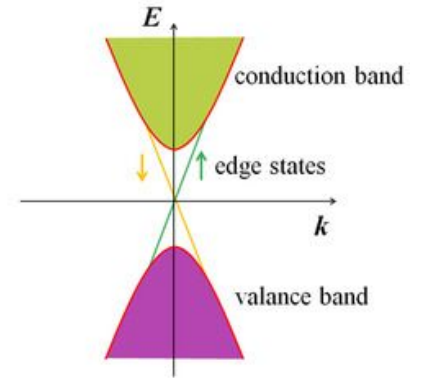


Tópicos modernos

Materiais topológicos



(a)



(b)