

Física del Estado Sólido I

Resumen:

La Física del Estado Sólido trata sobre las propiedades que resultan de la distribución de un número muy grande de electrones e iones en metales, semiconductores y aislantes. Estas propiedades son, en muchas ocasiones, sorprendentes y de gran utilidad.

La asignatura de **Física del Estado Sólido I** es una introducción a la Física de los Sólidos que está destinada a estudiantes del cuarto curso de la licenciatura de Ciencias Físicas con 8 créditos ECTS. El gran interés que despierta esta asignatura se debe a que se encuentra en continua evolución y expansión, a medida que se realizan nuevos descubrimientos.

Durante los últimos diez años, un alto porcentaje de Premios Nobel en Física ha sido concedido a descubrimientos fundamentales realizados en el área de la Física del Estado Sólido tales como, por ejemplo: la superfluidez del Helio-3 (1996), el desarrollo de métodos para el enfriamiento y atrapamiento de átomos con láseres (1997) y el efecto Hall cuántico fraccionario (1998).

La Física del Estado Sólido entraña una gran complejidad dado que trata sobre el comportamiento de un número muy grande de partículas, cuya dinámica se rige por las leyes de la Mecánica Cuántica. Se espera, por lo tanto, que los estudiantes que comiencen una Introducción al Estado Sólido tengan conocimientos bien asentados sobre Mecánica Cuántica y Mecánica Estadística.

A continuación expongo un breve resumen del contenido de la asignatura para más adelante dar una descripción detallada de cada uno de los temas que contiene. La asignatura comienza con los aspectos más elementales de la teoría de electrones libres aplicada a los metales. Este primer capítulo no requiere un conocimiento profundo sobre otras áreas de la Física introduciendo directamente al estudiante en los problemas claves

que afronta una teoría completa de las propiedades de aislantes, metales y semiconductores. Por ejemplo, deja entrever la relevancia de la periodicidad de la red cristalina en las propiedades metálicas y plantea la pregunta fundamental de cómo es la dinámica de los electrones en presencia de un potencial periódico, tal como la que existe en los cristales. La importancia de la estructura cristalina nos obliga, atendiendo a la geometría de la red a clasificar los distintos tipos de cristales que aparecen comúnmente en la naturaleza e introducir la noción de espacio recíproco asociado al espacio real.

Tras introducir al estudiante a la terminología necesario para describir cristales se analiza, en detalle, como influye el potencial periódico de la red en la dinámica de los electrones en sólidos. Esto nos lleva automáticamente al teorema de Bloch, que tiene consecuencias fundamentales como el hecho de que los electrones se propagan en un cristal con periodicidad perfecta sin sufrir colisiones con los iones dando lugar a una conductividad infinita, en contra de lo predicho por el modelo clásico. En el modelo de Drude, los electrones recorren un camino que es sólo del orden del parámetro de red sin sufrir colisiones con los iones. El teorema de Bloch en la representación de ondas planas o electrones localizados nos lleva al concepto de estructura de bandas del sólido y a los distintos métodos para obtenerlas.

La teoría de Bloch no describe correctamente el hecho de que la conductividad en los cristales es finita, lo que se debe a que se desprecian las desviaciones de los iones de la periodicidad perfecta. Necesitamos por tanto analizar el efecto de éstas desviaciones en la dinámica de los electrones. El caso más sencillo de tratar es el de cristal armónico, el cual se trata tanto clásica como cuánticamente. Se introduce el concepto de “fonón” como partícula que describe de forma equivalente y conveniente las excitaciones colectivas asociadas a las vibraciones de la red. Se hace hincapié en las propiedades termodinámicas y de transporte que se derivan de la interacción de los electrones con las vibraciones de la red. Por ejemplo, la dependencia con la temperatura del calor específico y de la resistividad y cómo esta dependencia no puede ser entendida sin tener en cuenta la presencia de las vibraciones de la red.

El estudio del transporte en los metales se basa en primera aproximación en la teoría semiclásica a través de la ecuación de Boltzmann. A pesar de que este tratamiento es general también es complicado de forma que su aplicación a sistemas reales se simplifica enormemente con el uso de la aproximación de “tiempo de relajación”. Se

hace uso de la ecuación de Boltzmann para aclarar las limitaciones de esta aproximación y ponerlas de manifiesto. A partir de las ecuaciones que rigen el movimiento semiclásico de los electrones en presencia de campos eléctricos y magnéticos describimos las propiedades de transporte de metales tales como la resistividad, coeficiente Hall y el poder termoeléctrico. Las expresiones semiclásicas que se derivan de este tratamiento permiten el análisis de las propiedades de transporte de cualquier sistema con un número arbitrario de bandas donde la dispersión de los electrones se debe fundamentalmente a la interacción con las vibraciones de la red suponiendo que la interacción electrón-electrón es muy pequeña (metales convencionales). En sistemas donde la interacción electrón-electrón es la dominante tales como metales de transición, óxidos de metales de transición, conductores orgánicos, cupratos y fermiones pesados, se debe ir más allá en esta teoría. Dada la simplicidad y la gran relevancia que la teoría del líquido de Fermi tiene en las propiedades de algunos de los sistemas citados, el último capítulo lo dedicamos a discutir los efectos de la interacción entre los electrones en las propiedades electrónicas de metales donde una descripción en términos de quasipartículas es apropiada.

Los capítulos 0, 1, 3, 4 y 5 correspondientes a las propiedades del gas de electrones libres y de electrones en presencia de un potencial periódico, siguen el libro de N. Ashcroft y D. Mermin: *“Solid State Physics”*. El capítulo 2 referente a la descripción y determinación de las distintas estructuras cristalinas en sólidos sigue el libro de C. Kittel: *“Introduction to Solid State Physics”*. Tanto la descripción clásica de las vibraciones de la red como su cuantización, los “fonones”, que aparecen en los capítulos 6 y 7 siguen también el libro de N. Ashcroft y D. Mermin. Por otro lado, los capítulos 8 y 9 que tratan sobre las propiedades de transporte en sólidos se encuentran basados en el libro de N. Mott y H. Jones: *“The Theory of the properties of metals and alloys”*.

Finalmente, el capítulo 10 que trata sobre los efectos de la interacción electrón-electrón en sólidos sigue los libros de P. Nozieres: *“The Theory of Quantum Liquids”* y de Abrikosov, Gorkov y Dzaluzinski: *“Methods of Quantum Theory in Statistical Physics”*.

Contenido:

A continuación desgloso la asignatura de Física del Estado Sólido I en once bloques temáticos o capítulos que la constituyen. Cada uno de los bloques corresponde aproximadamente a una semana de 3-4 horas de clase.

0. LA TEORÍA CLÁSICA DEL GAS DE ELECTRONES LIBRES: EL MODELO DE DRUDE.

- 0.1** Hipótesis básicas del modelo de Drude. Tiempo de relajación y conductividad eléctrica.
- 0.2** Efecto Hall y Magnetoresistencia. Conductividad eléctrica AC.
- 0.3** Función dieléctrica y frecuencia de plasma. Conductividad térmica y poder termoeléctrico.

1. LA TEORÍA CUÁNTICA DEL GAS DE ELECTRONES LIBRES: MODELO DE SOMMERFELD.

- 1.1** Descripción cuántica del gas de electrones libres a $T=0$: el modelo de Sommerfeld.
- 1.2** Propiedades térmicas del gas de electrones libre.
- 1.3** Conducción en metales a partir de la teoría de Sommerfeld. Comparación de las predicciones de la teoría de Drude y de Sommerfeld.

2. ESTRUCTURAS CRISTALINAS Y LA RED RECÍPROCA.

- 2.1** Estructuras cristalinas: la red de Bravais y vectores primitivos.
- 2.2** Determinación de estructuras cristalinas con difracción de rayos-X. Formulación Bragg y Von Laue. Factor de estructura geométrico y atómico.

3. ELECTRONES EN POTENCIALES PERIÓDICOS.

- 3.1** El teorema de Bloch. Demostración del teorema de Bloch.
- 3.2** La superficie de Fermi. Metales, aislantes y semiconductores.

4. LA APROXIMACIÓN DE ELECTRONES CUASI-LIBRES.

4.1 Ecuación de Schrödinger para un potencial periódico débil.

4.2 Planos Bragg. Estructura de bandas: zonas extendida, reducida y repetida.

5. LA APROXIMACIÓN DE ELECTRONES LOCALIZADOS.

5.1 Descripción de los estados electrónicos en términos de orbitales atómicos localizados.

5.2 Ejemplos de cálculo de estructura de bandas y comparación de distintos métodos.

6. TEORÍA CLÁSICA DE VIBRACIONES EN UN CRISTAL.

6.1 Limitaciones de la teoría estática de la red iónica.

6.2 Teoría clásica del cristal armónico. Calor específico: la ley de Dulong y Petit.

6.3 Modos normales de una cadena unidimensional monoatómica.

6.4 Modos normales de una cadena unidimensional diatómica: modos acústicos y ópticos.

7. TEORÍA CUÁNTICA DE LAS VIBRACIONES EN UN CRISTAL.

7.1 Cuantización del hamiltoniano del cristal armónico: Fonones.

7.2 Calor específico del cristal armónico cuántico.

7.3 Modelos de Debye y Einstein del calor específico.

8. MODELO SEMICLÁSICO DE LA DINÁMICA DE ELECTRONES EN METALES.

8.1 Dinámica de los electrones en presencia de la red iónica.

8.2 Conductores, aislantes y semiconductores. Portadores de carga efectivos: electrones y huecos.

8.3 Electrones libres en presencia de un campo magnético uniforme.

9. MODELO SEMICLÁSICO DEL TRANSPORTE EN METALES.

- 9.1 La ecuación de Boltzmann y la aproximación del tiempo de relajación.
- 9.2 Conductividad eléctrica. Corriente en metales y en aislantes.
- 9.3 Conductividad térmica y la ley de Wiedemann-Franz. Poder termoeléctrico.

10. EFECTOS DE LA INTERACCIÓN ELECTRÓN-ELECTRÓN: APROXIMACIÓN HARTREE-FOCK, APANTALLAMIENTO Y LA TEORÍA DE LANDAU DEL LÍQUIDO DE FERMI.

- 10.1 Electrones interactuando débilmente: aproximación Hartree y Hartree-Fock.
- 10.2 Apantallamiento: método de Thomas-Fermi.
- 10.3 Teoría de Landau del líquido de Fermi: Noción de cuasipartícula y cuasihueco, interacción entre cuasipartículas, función de distribución de cuasipartículas.
- 10.4 Propiedades de las cuasipartículas: velocidad, masa efectiva y calor específico. Comparación con las propiedades del gas de Fermi.

Bibliografía

Textos recomendados:

- *Solid State Physics*, N. W. Ashcroft y N. D. Mermin, (Thomson Learning, 1976).
- *Introducción a Solid State Physics*, C. Kittel, 7ª Edición (John Wiley 1996).
- *Solid State Physics*, H. Ibach y H. Luth (Springer-Verlag 1991).
- *Principles of the theory of solids*, J. M. Ziman (Cambridge 1972).

Textos complementarios:

- *The Theory of the properties of metals and ions*, N. F. Mott y H. Jones (Dover 1958).
- *Solid State Theory*, W. A. Harrison, (McGraw-Hill, 1970).
- *Quantum theory of solids*, C. Kittel (J. Wiley, 2ª edición 1987).
- *Quantum theory of solids*, R. L. Peierls (Oxford University Press, 1955).
- *Statistical Mechanics*, R. P. Feynman, (Addison-Wesley, 13ª Edición, 1990).
- *Theory of interacting Fermi systems*, P. Nozières, (Addison-Wesley, 1997).
- *The Theory of Quantum Liquids I*, D. Pines and P. Nozières, (W. A. Benjamin, Menlo Park, California, 1966).
- *Basic notions of condensed matter physics*, P. W. Anderson (Addison-Wesley, 1997).

