PGF5110 - Estado Sólido I

Lista de exercícios 4 - 2017 (entrega em 04/12/2017)

1. Modelo para a condutividade térmica em 1D

Metais que são bons condutores de eletricidade são, em geral, também bons condutores de calor. Veremos que a condutividade térmica κ de um metal pode também ser bem descrita pela aproximação de tempo de relaxação.

Quando a temperatura de um metal não é uniforme e varia com a posição [$T = T(\mathbf{r})$], os elétrons podem "carregar" energia térmica de um ponto a outro, produzindo uma densidade de corrente de calor (energia térmica por unidade de tempo e unidade de área) $\mathbf{J}_Q$ dada pela chamada *Lei de Fourier*:

$$\mathbf{J}_Q = -\kappa \nabla T(\mathbf{r})$$

onde κ é a *condutividade térmica* do material.

Consideremos agora um modelo para de um fio (1D) de comprimento L com densidade de elétrons $n = N/L$ e cuja temperatura $T[x] = T_0 - (T_0 - T_1).\frac{x}{L}$ varia ao longo do fio ($T_0 > T_1$, de modo que o fio está mais quente em sua extremidade esquerda). O modelo consiste nas seguintes hipóteses:

- A energia térmica de um elétron na posição x é dada por $\epsilon(T[x])$.
- Os elétrons apenas termalizam (perdem o excesso de energia térmica) quando colidem.
- O tempo médio entre colisões sucessivas é τ.
- A velocidade média dos elétrons entre colisões em uma dada direção é $\langle v_x \rangle = \frac{2}{N}\sum_i v_{x,i}$.
- O fator "2" acima vem do fato que, em média, metade dos elétrons se desloca da esquerda para a direita (velocidade média positiva $+v_{x,i}$) e a outra metade se desloca da direita para a esquerda (velocidade negativa $-v_{x,i}$). Desta forma, não há corrente elétrica, apenas de calor.
- Para partículas que se movem na direção x, a densidade de corrente térmica J_Q na posição x' será o *fluxo* de energia por unidade tempo e será proporcional à diferença entre as energias térmicas dos elétrons que vem da esquerda ($x < x'$) e da direita ($x > x'$).

(a) Considere dois elétrons com velocidades $v_{x,i}$ e $-v_{x,i}$ respectivamente, chegando em $x = x'$ em um tempo t após sua última colisão. Calcule a contribuição deste par de elétrons para $J_Q(x')$ em termos de $\left.\frac{dT[x]}{dx}\right|_{x=x'}$.

(b) Calcule a contribuição média de todos os elétrons para $J_Q(x')$. Mostre que, escrevendo,

$$J_Q(x') = -\kappa \left.\frac{dT[x]}{dx}\right|_{x=x'}$$

obtemos que κ é proporcional à capacidade calorífica $C_{\text{el}} = \frac{1}{L}\frac{d\langle E\rangle}{dT}$ onde $\langle E\rangle = N\langle\epsilon\rangle$ é a energia média total dos elétrons.

Dica: assuma que $v_{x,i}^2$ e t sejam variáveis estatisticamente independentes.

(c) Generalize o resultado do item anterior para partículas que se movem em 3D (agora $\mathbf{J}_Q$ será energia por unidade de área por unidade de tempo) e mostre que a condutividade térmica será dada por:

$$\kappa = \frac{1}{3}\langle v^2\rangle \tau C_{\text{el}}(T)$$

Dica: use o resultado-padrão de Teoria Cinética dos Gases: $\langle v_x^2\rangle = \langle v_y^2\rangle = \langle v_z^2\rangle = \frac{1}{3}\langle v^2\rangle$.

(d) Calcule κ no modelo de Sommerfeld.

(e) Mostre que os resultados acima levam à Lei de Wiedmann-Franz:

$$L = \frac{\kappa}{\sigma_0 T} = L_0$$

onde σ_0 é a condutividade elétrica (calculada na Lista 1) e L_0 é uma constante.

2. Magnetoresistência com portadores p e n

Em aula, calculamos o tensor de resistividade para portadores tipo n (elétrons) em um campo magnético na aproximação de tempo de relaxação. Mostramos que, mesmo considerando termos até ordem $(\omega_c\tau)^2$, a resistividade longitudinal ρ_{xx} não dependia do campo magnético por conta de um cancelamento destes termos. Ou seja, este modelo não descreve a magnetoresistência $\rho_{xx}(B)$.

Os experimentos, no entanto, mostram outra coisa: ρ_{xx} depende sim de B, embora esta dependência seja mais fraca que a de $\rho_{xy}(B)$ (que é linear para B pequeno).

Argumentamos (sem mostrar) que o aparecimento da magnetoresistência $\rho_{xx}(B)$ se deve à contribuição de outros tipos de portadores para a resistividade. O objetivo deste exercício é elucidar este fato.

Considere então que a densidade de corrente tem contribuições de portadores dos tipos p e n: :

$$\mathbf{J} = (-e)n\langle\mathbf{v}_e\rangle + ep\langle\mathbf{v}_h\rangle$$

onde p e n são as densidades dos portadores e $\langle \mathbf{v}_{e(h)} \rangle$ são as velocidades de *drift*. Considere um campo magnético $\mathbf{B} = B\hat{e}_z$ e massas efetivas/tempos de relaxação diferentes para elétrons e buracos: $m_e^* \neq m_h^*$, $\tau_e \neq \tau_h$.

(a) Na aproximação de tempo de relaxação, escreva as expressões para as componentes de $\langle \mathbf{v}_e \rangle$ e $\langle \mathbf{v}_h \rangle$ em termos das componentes do campo elétrico e incluindo os termos em $(\omega_c^e \tau_e)^2$ e $(\omega_c^h \tau_h)^2$.

(b) Calcule o tensor de condutividade em termos de $en\mu_e$ e $ep\mu_h$ onde μ_e e μ_h são as mobilidades de elétrons e buracos respectivamente.

(c) Calcule o tensor de resistividade. Mostre que a componente ρ_{xx} agora *depende* do campo magnético.

(d) Use um script (Mathematica, Python, Julia) para fazer gráficos de $\rho_{xx}(B)$ e $\rho_{xy}(B)$(em Ω.m) versus B variando entre 0 e 2 Tesla para os seguintes parâmetros:

    Gap: $E_g = 1.43$ eV

    $m_e^* = 0.067 m_0$ e $m_h^* = 0.45 m_0$

    $\mu_e = 8600$ cm^2/V.s e $\mu_h = 400$ cm^2/V.s

    Considere n=p e T=300 K.

    Dica: use as várias tarefas que fizemos abordando conversão de unidades, cálculo de densidade de portadores, estimativa de $\omega_c \tau$, etc. Não é necessário re-derivar as expressões (mas cuidado com os fatores de conversão!)

    Dica 2: um teste importante no seu script é fazer o gráfico de $\rho_{xy}(B)$ com $m_e^* = m_h^*$ e $\mu_e = \mu_h$. O que deveria ocorrer neste caso?

(e) Da análise acima, o que você conclui sobre os comportamentos de $\rho_{xx}(B)$ e $\rho_{xy}(B)$ para B baixo (menor que 1 Tesla)?