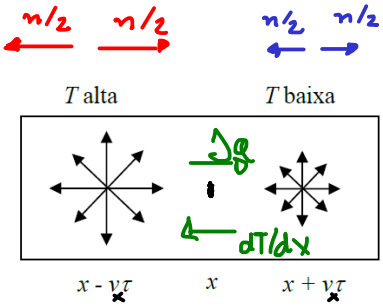
(D) Condutividade térmica e lei de Wiedemann - Franz

Exemplo em 1D:



$x \pm v_x \tau$: posições médias da última colisão p/ elétrons em x que vieram da esq. (-) e dir. (+)

$T(x - v_x\tau) > T(x + v_x\tau) \Rightarrow \varepsilon(x - v_x\tau) > \varepsilon(x + v_x\tau)$

↳ corrente de energia da esq. p/ a dir.!

Densidade de corrente de energia:

$$j^Q = \frac{1}{2} n\, \varepsilon(x - v_x\tau).v_x \quad - \frac{1}{2} n\, \varepsilon(x + v_x\tau).v_x$$

$\vec{j}_e = \rho_e . \vec{v} = -ne.\vec{v}$

$\vec{j}_Q = \rho_u . \vec{v} = n.\varepsilon\vec{v}$

note: $n\varepsilon$ = densidade de energia

Expandindo as energias em torno de x:

$$\varepsilon(x \pm v_x\tau) = \varepsilon(x) + \frac{d\varepsilon}{dx}(\pm v_x\tau) \qquad \varepsilon(x) = \varepsilon(T(x))$$

$$= \varepsilon(x) \pm \frac{d\varepsilon}{dT}\cdot\frac{dT}{dx} v_x\tau$$

Logo:

$$\boxed{j^Q = -n v_x^2 \tau \frac{d\varepsilon}{dT}\cdot\frac{dT}{dx}}$$

(lei de Fourier)

$$j^Q = \frac{1}{A}\frac{dQ}{dt}$$

$$\frac{dQ}{dt} = -kA\frac{dT}{dx}$$

Generalização p/ 3D

v_x^2 → veloc. quadrática média $\langle v_x^2\rangle$

$$\langle v^2\rangle = \langle v_x^2\rangle + \langle v_y^2\rangle + \langle v_z^2\rangle = 3\langle v_x^2\rangle \Rightarrow \langle v_x^2\rangle = \frac{1}{3}\langle v^2\rangle$$

analogamente: $j^Q \to j_x^Q$ e $\frac{dT}{dx} \to \frac{\partial T}{\partial x}$

Portanto:

$$\vec{j}^{\,q} = -\frac{1}{3} v^2 \tau c_V \vec{\nabla} T$$

onde

$$c_V = n \frac{dE}{dT} = \frac{1}{V} \frac{dE}{dT}$$

($n = N/V$, $E = E/N$)

↳ calor específico

Podemos escrever o resultado acima como $\vec{j}^{\,q} = -\kappa \vec{\nabla} T$, onde:

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

(condutividade térmica)

Lembre que: $\sigma_D = \frac{n e^2 \tau}{m}$

Lei de Wiedemann - Franz

A razão entre κ e σ_D (condutividade DC) é:

$$\frac{\kappa}{\sigma_D} = \frac{\frac{1}{3} v^2 \tau c_V}{n e^2 \tau / m} = \frac{1}{3} \frac{c_V m v^2}{n e^2}$$

Cálculo quântico:

$c_V \sim T/T_F$

$\frac{1}{2} m \langle v^2 \rangle = \frac{E}{N} \sim k_B T_F$

Cálculo clássico (e incorreto):

Pelo teorema da equipartição da energia:

$$c_V = \frac{3}{2} n k_B \quad e \quad \frac{1}{2} m \langle v^2 \rangle = \frac{3}{2} k_B T$$

Logo:

$$\frac{\kappa}{\sigma_D} = \frac{1}{3} \cdot \frac{3/2\, n k_B \cdot 3 k_B T}{n e^2} \Rightarrow \boxed{\frac{\kappa}{\sigma_D} = \frac{3}{2} \left(\frac{k_B}{e}\right)^2 T}$$

(Lei de Wiedemann - Franz)

Constante de proporcionalidade: $\frac{3}{2}\left(\frac{k_B}{e}\right)^2 \simeq 1{,}1 \times 10^{-8}\ W\Omega/K^2$

(~ metade do valor experimental)

Obs: Drude obteve o resultado errado por um fator 2, o que acabou "reproduzindo" os resultados experimentais!

Table 1.6
EXPERIMENTAL THERMAL CONDUCTIVITIES AND LORENZ NUMBERS OF SELECTED METALS

ELEMENT	273 K		373 K	
	κ (watt/cm-K)	$\kappa/\sigma T$ (watt-ohm/K^2)	κ (watt/cm-K)	$\kappa/\sigma T$ (watt-ohm/K^2)
Li	0.71	2.22×10^{-8}	0.73	2.43×10^{-8}
Na	1.38	2.12		
K	1.0	2.23		
Rb	0.6	2.42		
Cu	3.85	2.20	3.82	2.29
Ag	4.18	2.31	4.17	2.38
Au	3.1	2.32	3.1	2.36
Be	2.3	2.36	1.7	2.42
Mg	1.5	2.14	1.5	2.25
Nb	0.52	2.90	0.54	2.78
Fe	0.80	2.61	0.73	2.88
Zn	1.13	2.28	1.1	2.30
Cd	1.0	2.49	1.0	
Al	2.38	2.14	2.30	2.19
In	0.88	2.58	0.80	2.60
Tl	0.5	2.75	0.45	2.75
Sn	0.64	2.48	0.60	2.54
Pb	0.38	2.64	0.35	2.53
Bi	0.09	3.53	0.08	3.35
Sb	0.18	2.57	0.17	2.69

Source: G. W. C. Kaye and T. H. Laby, *Table of Physical and Chemical Constants*, Longmans Green, London, 1966.

~ nº de Lorenz

~ Por que o resultado clássico se aproxima do experimental?

~ Cálculo quântico (p/ $T \ll T_F$):

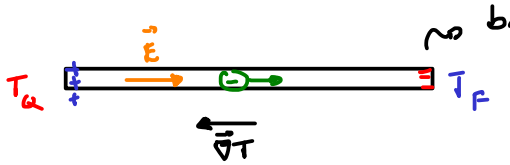
$$C_V \sim k_B \frac{T}{T_F} \quad \text{e} \quad \frac{1}{2} m v^2 \sim \varepsilon_F = k_B T_F$$

$$\Rightarrow \quad C_V \cdot m v^2 \sim k_B \frac{T}{T_F} \cdot k_B T_F = k_B^2 T \; !!$$

↳ cancelamento de T_F no produto acima!

Efeito Seebeck:

~ Pela discussão acima, vimos que há um movimento líquido de elétrons de uma região + quente p/ uma + fria.



~ barra condutora eletricamente isolada

~ Mov. de elétrons gera uma polarização nas extremidades da barra => campo elétrico $\vec{E}$ induzido.

~ $\vec{E}$ freia o mov. de elétrons subsequentes. No equilíbrio, o mov. cessa e:

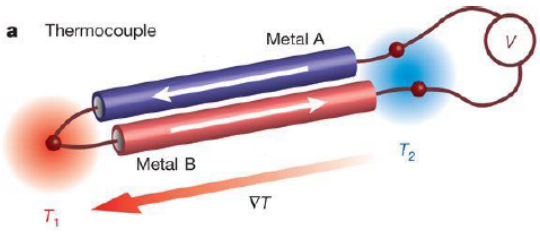
$$\boxed{\vec{E} = S \vec{\nabla} T}$$

S = coeficiente de Seebeck

(note que $S < 0$)

Estimativa de S → ver lista

Aplicação : Termopares



↳ d.d.p. é proporcional a $\vec{\nabla} T$

$$V \propto (S_B - S_A)(T_1 - T_2)$$

↳ Uso em termômetros e, potencialmente, em carregadores.

↳ Sensibilidade / eficiência depende de $S_B - S_A$.

Material	Seebeck coefficient *relative to platinum* (μV/K)
Selenium	900
Tellurium	500
Silicon	440
Germanium	330
Antimony	47
Nichrome	25
Molybdenum	10
Cadmium, tungsten	7.5
Gold, silver, copper	6.5
Rhodium	6.0
Tantalum	4.5
Lead	4.0
Aluminium	3.5
Carbon	3.0
Mercury	0.6
Platinum	0 (definition)
Sodium	-2.0
Potassium	-9.0
Nickel	-15
Constantan	-35
Bismuth	-72

Fonte: Wikipedia

Efeito "inverso" → Efeito Peltier (veja a apostila e pesquise)

6.2. Teoria semi-clássica

(i) Introdução e limites de validade

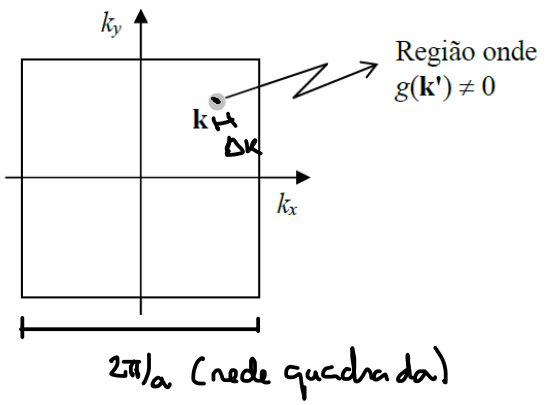
- Interação do elétron c/ o cristal é tratada quanticamente.
  → estrutura de bandas $E_n(\vec{k})$
- Interação do elétron c/ campos $\vec{E}$ e $\vec{B}$ externos é tratada classicamente.

↝ Para essa descrição, precisamos determinar simultaneamente a posição $\vec{r}$ e o momento cristalino $\vec{k}$ do elétron c/ razoável precisão → como conciliar c/ o princípio da incerteza?

Pacote de funções de onda de Bloch:

$$\psi_n(\vec{r},t) = \sum_{\vec{k}'} g(\vec{k}')\, \psi_{n\vec{k}'}(\vec{r})\, e^{-i\varepsilon_n(\vec{k}')\,t/\hbar}$$

$\vec{k}$ do pacote será bem definido se $g(\vec{k}')$ for uma função localizada em torno de $\vec{k}$ na 1ª zona de Brillouin:



- $g(\vec{k}') \simeq 0$ se $|\vec{k}' - \vec{k}| > \Delta k$
- $\Delta k \ll 1/a$ (largura da ZB)

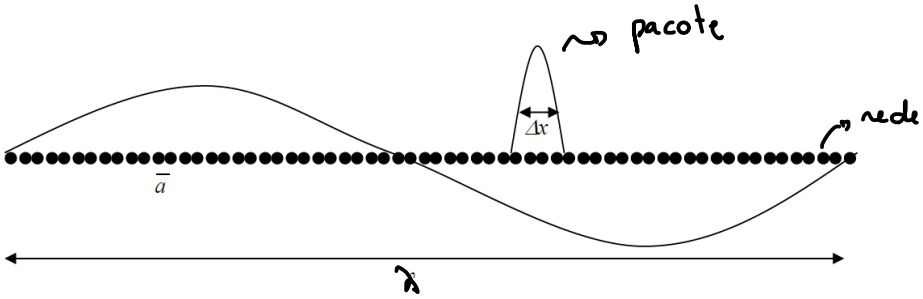
↝ Pelo princípio da incerteza:

$$\Delta x\, \underbrace{\Delta k}_{\ll 1/a} > 1 \quad \Rightarrow \quad \Delta x \gg a$$

Por outro lado, $\vec{r}$ será bem definido se a largura do pacote Δx for muito menor que a escala de variação dos campos externos, tipicamente definida por um comprimento de onda λ.

$$\Rightarrow \Delta x \ll \lambda$$

Portanto, o regime de validade da teoria é:



$$a \ll \Delta x \ll \lambda$$

- Funciona bem p/ a luz visível, c/ $\lambda \sim 400 - 750$ nm.
- Mas e p/ raios-X, c/ $\lambda \sim$ Å ??

(ii) Regras de aplicação e equações de movimento

Regras de aplicação:

1. Índice de banda n é uma cte de movimento.
   - Transições inter-banda são efeitos quânticos (absorção ou emissão de fótons), logo são desconsideradas aqui.

2. $\vec{k}$ é 1ª zona de Brillouin. $\vec{k}$'s fora da 1ª zona são trazidos p/ dentro dela por meio de translações por vetores $\vec{G}$ da rede recíproca ($\vec{k}$ e $\vec{k} + \vec{G}$ são equivalentes).

Velocidade de grupo:

A partir da definição do pacote, vemos que:

$$\boxed{v_n(\vec{k}) = \frac{\partial \omega_n(\vec{k})}{\partial \vec{k}} = \frac{1}{\hbar} \vec{\nabla}_{\vec{k}} \varepsilon_n(\vec{k})}$$

↳ Coincide c/ a velocidade de banda definida anteriormente p/ os elétrons de Bloch ($\langle \psi_{n\vec{k}} | \vec{p}/m | \psi_{n\vec{k}} \rangle$)!

Equações de movimento:

Pode-se mostrar que, nessa teoria:

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = \vec{v}_n(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar}\vec{\nabla}_{\vec{k}}\,\varepsilon_n(\vec{k})$$

$$\frac{d(\hbar\vec{k})}{dt} = \vec{F}_{ext} = -e\left[\vec{E} + \vec{v}_n(\vec{k}) \times \vec{B}\right]$$

ver tbm: Marder - cap. 16

- Demonstração (complexa): ver livro "Marvin L. Cohen, Steven G. Louie - Fundamentals of Condensed Matter Physics" - cap. 5.

- Note: $\hbar\vec{k}$ é definido apenas pela força externa, mas esta não é a única força que atua sobre o elétron! Isto confirma que $\hbar\vec{k}$ não pode corresponder ao momento linear do elétron.

- Note: Forças exercidas pelo pot. cristalino aparecem na teoria por meio de $\varepsilon_n(\vec{k})$!

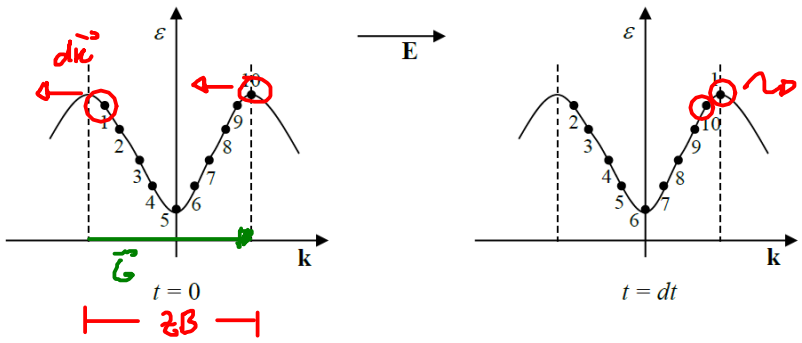
(iii) Consequências

(A) Bandas totalmente preenchidas não contribuem p/ a condução

p/ um campo elétrico constante $\vec{E}$, a eq. de mov. p/ $\hbar\vec{k}$ dá:

$$\hbar\dot{\vec{k}} = -e\vec{E} \Rightarrow \boxed{\vec{k}(t) = \vec{k}(0) - \frac{e\vec{E}}{\hbar}t}$$

↳ todos os elétrons sofrem uma mesma variação $\Delta\vec{k}$ em um mesmo intervalo Δt => banda permanece totalmente preenchida.



↳ elétron 1 é reposicionado por uma translação por um vetor $\vec{G}$ da rede recíproca.

Densidade de corrente:

O nº de pontos $\vec{k}$ contidos em um volume d^3k do esp. $\vec{k}$ é:

$$\frac{d^3K}{(2\pi)^3/V} = V\,\frac{d^3k}{8\pi^3}$$

Portanto, o nº de ptos $\vec{k}$ por un. de volume é:

$$\frac{d^3k}{8\pi^3}$$

Como cada ponto $\vec{k}$ acomoda 2 elétrons, teremos:

$$\vec{j} = \int_{ZB} (2)\,\frac{d^3k}{8\pi^3}\,(-e)\cdot\vec{v}(\vec{k})$$

↳ integral se estende por toda a ZB pois a banda está cheia.

↳ densidade eletrônica ("n")

$\vec{j} = n\cdot(-e)\cdot\vec{v}$

Como $\vec{v}(\vec{k}) = \vec{\nabla}_{\vec{k}}\,\varepsilon(\vec{k})/\hbar$:

$$\vec{j} = \frac{-e}{4\pi^3}\int_{ZB} d^3k\;\frac{\vec{\nabla}_{\vec{k}}\,\varepsilon(\vec{k})}{\hbar}$$

↳ célula primitiva do esp. recíproco!

Levando em conta que:

- $\varepsilon(\vec{k})$ tem a periodicidade da rede recíproca:

$$\varepsilon(\vec{k}+\vec{G}) = \varepsilon(\vec{k})$$

- $\int_{ZB} d^3k\;\vec{\nabla}_{\vec{k}}\,f(\vec{k}) = 0$ p/ qq. função $f(\vec{k})$ c/ a periodicidade da rede recíproca (ver Ashcroft - Apêndice I)

temos:

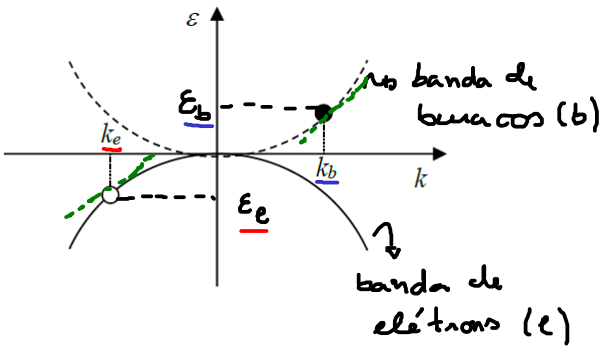
$$\boxed{\vec{j} = \vec{0}} \quad \text{p/ uma banda cheia}$$

↳ Apenas bandas parcialmente preenchidas contribuem p/ $\vec{j} \neq 0$! ⇒ metais e semimetais.

(B) Buracos:

↳ Conceito útil p/ descrever o comportamento de bandas quase totalmente preenchidas.

(i) Momento cristalino e energia do buraco



Note que:

Retirar um elétron c/ mom. cristalino $\vec{k}_e$ e energia $\varepsilon_e(\vec{k}_e)$

$\Vert$ (igual a)

Adicionar um buraco c/ mom. cristalino $-\vec{k}_e$ e energia $-\varepsilon_e(\vec{k}_e)$

Com isso, podemos definir uma banda de buracos com:

$$\boxed{\vec{k}_b = -\vec{k}_e \qquad \text{e} \qquad \varepsilon_b(\vec{k}_b) = -\varepsilon_e(\vec{k}_e)}$$

Note: Buraco não é uma nova quasipartícula, mas apenas uma forma alternativa de olhar p/ o problema!

(ii) Velocidade do buraco

Note que:

$$\hbar \vec{v}_b = \vec{\nabla}_{\vec{k}_b} \varepsilon_b(\vec{k}_b) = \vec{\nabla}_{\vec{k}_b}[-\varepsilon_e(\vec{k}_e)] = \vec{\nabla}_{-\vec{k}_e}[-\varepsilon_e(\vec{k}_e)] = \hbar \vec{v}_e$$

logo:

$$\boxed{\vec{v}_b = \vec{v}_e}$$

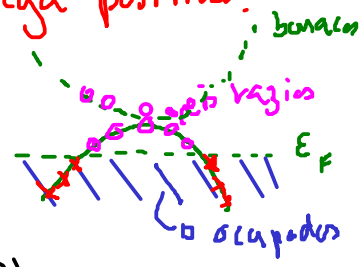
⇝ mesma velocidade!

(iii) Eq. de movimento:

Como $\vec{k}_b = -\vec{k}_e$ e $\vec{v}_b = \vec{v}_e$:

$$\hbar \dot{\vec{k}}_e = -e\left[\vec{E} + \vec{v}_e \times \vec{B}\right] \Rightarrow \boxed{\hbar \dot{\vec{k}}_b = +e\left[\vec{E} + \vec{v}_b \times \vec{B}\right]}$$

Os buracos se comportam como partículas de carga positiva!



(iv) Densidade de corrente

p/ qq. banda, temos:

$$\vec{j} = -\frac{e}{4\pi^3}\int_{oc.} d^3k\ \vec{v}_e(\vec{k})$$ ⇝ integral sobre $\vec{k}$'s ocupados.

Por outro lado, já vimos que a integral sobre a ZB é zero, logo:

$$\int_{ZB} d^3k\ \vec{v}_e(\vec{k}) = 0 = \int_{oc.} d^3k\ \vec{v}_e(\vec{k}) + \int_{desoc.} d^3k\ \vec{v}_e(\vec{k})$$

Com isso:

$$\boxed{\vec{j} = \oplus \frac{e}{4\pi^3}\int_{desoc.} d^3k\ \underbrace{v_e(\vec{k})}_{= v_b(\vec{k})} = \oplus \frac{e}{4\pi^3}\int_{\substack{oc. \\ (buracos)}} d^3k\ \vec{v}_b(\vec{k})}$$

⇝ Integral sobre $\vec{k}$'s desocupados na banda de elétrons ou $\vec{k}$'s ocupados na banda de buracos!

⇝ Mais uma manifestação de carga positiva ⇒ efeito Hall qdo R_H é positivo!

(c) Massa efetiva

Exemplo em 1D:

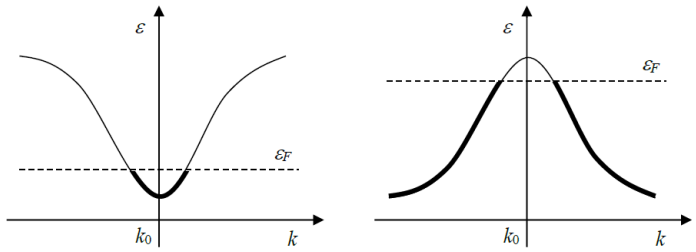


Figura 6.10 - Situações importantes onde o conceito de massa efetiva é útil: banda ocupada apenas em torno de um mínimo (esquerda) ou desocupada em torno de um máximo (direita).

Na vizinhança do máximo ou mínimo de uma banda:

$$\varepsilon(k) \simeq \varepsilon(k_0) + \left.\frac{d\varepsilon}{dk}\right|_{k_0}^{0} (k-k_0) + \frac{1}{2}\left.\frac{d^2\varepsilon}{dk^2}\right|_{k_0} (k-k_0)^2$$

Podemos reescrever como:

$$\boxed{\varepsilon(k) = \varepsilon(k_0) + \frac{\hbar^2}{2m^*}(k-k_0)^2}$$

onde:

$$\boxed{\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2}\left.\frac{d^2\varepsilon}{dk^2}\right|_{k_0}} \qquad m^* = \text{massa efetiva}$$

Note que:

- m^* é positivo na vizinhança de um mínimo.
- " " negativo " " " " máximo.

Eqs. de movimento:

- $v(k) = \frac{1}{\hbar}\frac{d\varepsilon}{dk} = \frac{1}{\hbar}\cdot\frac{\hbar^2}{2m^*}2(k-k_0) = \frac{\hbar}{m^*}(k-k_0)$
- $a = \dot{v} = \frac{\hbar}{m^*}\dot{k} = \frac{1}{m^*}F_{ext} \Rightarrow \boxed{F_{ext} = m^* a}$

↕

2ª Lei de Newton com massa m^*!

↝ Forças devidas ao pot. cristalino aparecem exclusivamente via m^* na eq. acima.

↝ Quando $m^* < 0$, aceleração a tem sentido oposto a F_{ext}! ⇒ conceito de buracos é útil.

Generalização para 3D:

Na vizinhança de um mínimo ou máximo em $\vec{k}_0$:

$$\varepsilon(\vec{k}) = \varepsilon(\vec{k}_0) + \sum_i \cancel{\frac{\partial \varepsilon}{\partial k_i}\Big|_{\vec{k}_0}}^{\,0} (\vec{k}-\vec{k}_0)_i + \frac{1}{2}\sum_{i,j} (\vec{k}-\vec{k}_0)_i \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial k_i \partial k_j}\Big|_{\vec{k}_0} (\vec{k}-\vec{k}_0)_j$$

↳ $i, j = x, y, z$

logo:

$$\boxed{\varepsilon(\vec{k}) = \varepsilon(\vec{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2}(\vec{k}-\vec{k}_0)\cdot M^{-1}\cdot(\vec{k}-\vec{k}_0)}$$

↳ matriz 3x3!

onde:

$$\boxed{M^{-1}_{ij} = \frac{1}{\hbar^2}\frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial k_i \partial k_j}\Big|_{\vec{k}_0}}$$

↝ Tensor massa efetiva inversa

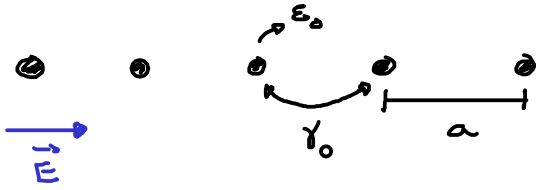
↝ Massa efetiva pode ser anisotrópica em 3D ⇒ $\vec{a}$ e $\vec{F}_{ext}$ podem ter direções diferentes! (ver lista)

Movimento em $\vec{E}$ cte: oscilações de Bloch

$$\hbar \dot{\vec{k}} = -e\vec{E} \quad \Rightarrow \quad \vec{k}(t) = \vec{k}_0 - \frac{e\vec{E}}{\hbar} t$$

Vamos aplicar o resultado acima p/ uma estrutura de bandas simples em 1D.

Exemplo: Cadeia monoatômica 1D



- 1 orbital s por átomo
- energia de sítio: ε_0
- hopping (1os vizinhos): γ_0
- overlap desprezado

No modelo TB acima, a dispersão é dada por:

$$\varepsilon(k) = \varepsilon_0 - 2\gamma_0 \cos(ka) \qquad \text{(verifique!)}$$

A eq. de movimento p/ $v(k)$ é:

$$v(k) = \frac{1}{\hbar}\frac{d\varepsilon}{dk} = \frac{2\gamma_0 a}{\hbar}\operatorname{sen}(ka) \qquad \text{Lembre } k(t) = k_0 - \frac{eE}{\hbar}t$$

Substituindo $k(t)$ e assumindo $x_0 = 0$:

$$v(t) = \frac{2\gamma_0 a}{\hbar}\operatorname{sen}\left(-\frac{eEt}{\hbar}\cdot a\right)$$

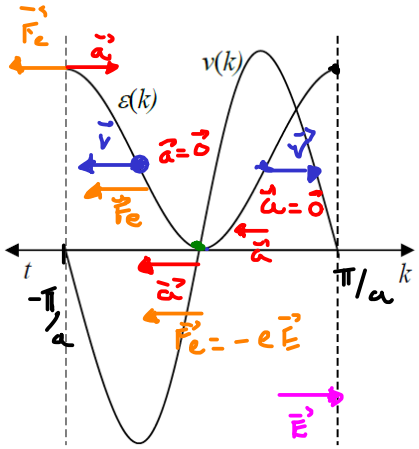
$$v(t) = -\frac{2\gamma_0 a}{\hbar}\operatorname{sen}\left(\frac{eEa}{\hbar}t\right)$$

Podemos reescrever este resultado como:

$$\boxed{v(t) = -v_0 \operatorname{sen}(\omega t)} \quad \text{com} \quad \boxed{v_0 = \frac{2\gamma_0 a}{\hbar}} \quad \text{e} \quad \boxed{\omega = \frac{eEa}{\hbar}}$$

⇒ Campo elétrico DC produz uma corrente AC! → Oscilações de Bloch

↳ Por que isto acontece? → mov. determinado por $\vec{E}$ e pelo potencial cristalino (via $\varepsilon(k)$):



Aceleração:

$$a(t) = \dot{v}(t) = -\omega v_0 \cos(\omega t) = -\kappa(t)\cdot a$$

↳ Elétrons são freiados quando se aproximam da borda da ZB!

↳ Na vizinhança da borda da ZB, os elétrons possuem massa efetiva negativa ⇒ $\vec{a}$ e $\vec{F}_e = -e\vec{E}$ têm sentidos opostos!

Sabemos, no entanto, que campos elétricos DC produzem correntes DC (lei de Ohm). Por que as oscilações não são observadas?

↳ Valores típicos:

$a \sim 1\,\text{Å} = 10^{-10}\,m$

$E \sim 1\,V/m$

$$\Rightarrow T = \frac{2\pi}{\omega} = \frac{2\pi\hbar}{eEa} \sim 10^{-5}\,s!$$

($\hbar \sim 10^{-34}\,J\cdot s$; $e \sim 10^{-19}\,C$; $a \sim 10^{-10}\,m$)

↳ período de oscilação

↳ Tempo médio entre colisões em um metal típico é $\tau \sim 10^{-14}\,s$!

↳ $T \gg \tau$ ⇒ elétron sofre muitas colisões e tem seu momento "reiniciado" muitas vezes antes de completar um período de oscilação.

↳ Oscilações podem ser observadas em sistemas artificiais por meio de uma engenharia de a. (ver apostila)

Obs: As oscilações de Bloch são uma característica geral do mov. c/ $\vec{E}$ cte, pois resultam da periodicidade de $\varepsilon(\vec{k})$ no espaço recíproco. (ver listas)

Movimento em $\vec{B}$ constante:

Eqs. de movimento:

$$\begin{cases} \hbar \dot{\vec{k}} = -e\, \vec{v}(\vec{k}) \times \vec{B} \\ \vec{v}(\vec{k}) = \dfrac{1}{\hbar} \vec{\nabla}_{\vec{k}}\, \varepsilon(\vec{k}) \end{cases} \Rightarrow \boxed{\hbar^2 \ddot{\vec{k}} = -e\, \vec{\nabla}_{\vec{k}}\, \varepsilon(\vec{k}) \times \vec{B}}$$

↳ $\dot{\vec{k}}$ deve ser perpendicular a $\vec{B}$ ⇒ mov. em planos $\perp$ a $\vec{B}$ no espaço $\vec{k}$

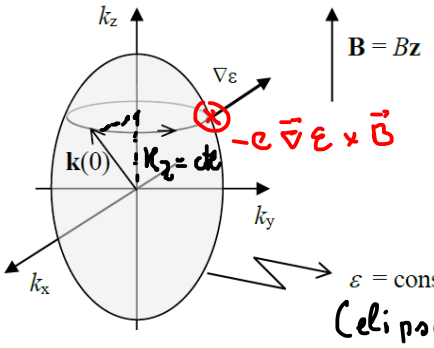
↳ $\dot{\vec{k}}$ deve ser perpendicular a $\vec{\nabla}_{\vec{k}}\, \varepsilon(\vec{k})$ ⇒ mov. ao longo de uma superfície de energia constante.

↳ Combinação das características acima define a trajetória no espaço $\vec{k}$!

Exemplo: Dispersão elíptica

$$\varepsilon(k_x, k_y, k_z) = \frac{\hbar^2}{2m_t}(k_x^2 + k_y^2) + \frac{\hbar^2}{2m_\ell} k_z^2$$

- m_t e m_ℓ: massas efetivas transversal e longitudinal ($m_\ell > m_t$)
- dispersão observada, por ex., no fundo da banda de condução do Si!



$$\frac{k_x^2}{m_t} + \frac{k_y^2}{m_t} + \frac{k_z^2}{m_l} = \text{cte}$$

- Se $\vec{B} = B\hat{z} \Rightarrow \dot{\vec{k}} \perp \hat{z} \Rightarrow$

$k_z(t) = \text{cte}$

- Movimento em sup. $\varepsilon = \text{cte}$:

$k_x^2(t) + k_y^2(t) = \text{cte}$

↳ trajetória circular!

↳ sentido anti-horário.

, O que aconteceria se $\vec{B} = B\hat{y}$?

Solução das eqs. de movimento:

Para $\vec{B} = B\hat{z}$:

$$\vec{v} = \frac{1}{\hbar}\vec{\nabla}\varepsilon(\vec{k})$$

$$\hbar\dot{k}_x = -e v_y B$$

$$\hbar\dot{k}_y = +e v_x B$$

$(e\ \hbar\dot{k}_z = 0)$

↳ $k_z(t) = \text{cte}$

Por outro lado:

$$v_x = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial\varepsilon}{\partial k_x} = \frac{\hbar}{m_t}k_x$$

$$v_y = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial\varepsilon}{\partial k_y} = \frac{\hbar}{m_t}k_y$$

$$v_z = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial\varepsilon}{\partial k_z} = \frac{\hbar}{m_l}k_z = \text{cte} \quad (\text{pois } k_z(t) = \text{cte})$$

Substituindo acima, obtemos:

$$\hbar\dot{k}_x = -e\frac{\hbar}{m_t}k_y B \qquad \hbar\dot{k}_y = +e\frac{\hbar}{m_t}k_x B$$

Derivando c/ relação a t:

$$\ddot{k}_x = -\frac{eB}{m_t}\dot{k}_y \qquad \ddot{k}_y = +\frac{eB}{m_t}\dot{k}_x$$

logo:

$$\ddot{k}_x = -\left(\frac{eB}{m_t}\right)^2 k_x \qquad \ddot{k}_y = -\left(\frac{eB}{m_t}\right)^2 k_y$$

$\left(\frac{eB}{m_t}\right) = \omega_c^2$

↝ Eqs. de oscilador harmônico com $\boxed{\omega_c = \frac{eB}{m_t}}$ (freq. de ciclotron)

$m^* = m_t$ (massa efetiva de ciclotron)

As soluções gerais são:

$$k_x(t) = A\cos\omega_c t + B\,\mathrm{sen}\,\omega_c t$$

$$k_y(t) = C\cos\omega_c t + D\,\mathrm{sen}\,\omega_c t$$

↝ $\dot{k}_y(t) = -\omega_c(\mathrm{sen}\,\omega_c t + D\omega_c\cdot\cos\omega_c t = \omega_c\cdot(A\cos\omega_c t + B\,\mathrm{sen}\,\omega_c t)$

Condição inicial: $k_x(0) = k_0$ e $k_y(0) = 0$

$\Rightarrow A = k_0$ e $C = 0$

Como $\dot{k}_y = \omega_c k_x$, temos ainda que $D = A$ e $C = -B$, logo:

$$\boxed{k_x(t) = k_0\cos\omega_c t} \qquad \boxed{k_y(t) = k_0\,\mathrm{sen}\,\omega_c t} \qquad \text{e } k_z(t) = \text{cte}$$

↳ Note que $k_x^2 + k_y^2 = k_0^2 = \text{cte}$, como observado anteriormente.

Velocidade:

$$v_x(t) = \frac{\hbar}{m_t}k_x(t) = \frac{\hbar k_0}{m_t}\cos\omega_c t$$

$$v_y(t) = \frac{\hbar}{m_t}k_y(t) = \frac{\hbar k_0}{m_t}\mathrm{sen}\,\omega_c t$$

e $v_z(t) = v_z(0) = \text{cte}$

Trajetória no espaço real:

$$x(t) = x_0 + \int_0^t v_x(t')\,dt' = x_0 + \frac{\hbar k_0}{m_t\omega_c}\mathrm{sen}\,\omega_c t$$

$$y(t) = y_0 + \int_0^t v_y(t')\,dt' = y_0 - \frac{\hbar k_0}{m_t\omega_c}(\cos\omega_c t - 1)$$

$$z(t) = z_0 + \int_0^t v_z(t')\,dt' = z_0 + v_z(0)\cdot t$$ ↝ MRU ao longo de z

Para simplificar, podemos escolher:

$$x_0 = 0 \quad e \quad y_0 = -\frac{\hbar k_0}{m_t \omega_c} = -\frac{\hbar k_0}{m_t eB/m_t} = -\frac{\hbar k_0}{eB} = -R$$

Logo:

$$x(t) = R \operatorname{sen} \omega_c t \qquad y(t) = -R\cos\omega_c t$$

↝ $x^2 + y^2 = R^2$

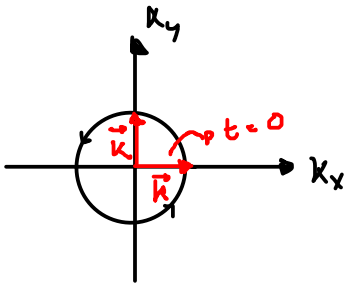
$$z(t) = z_0 + v_z(0).t$$

Portanto:

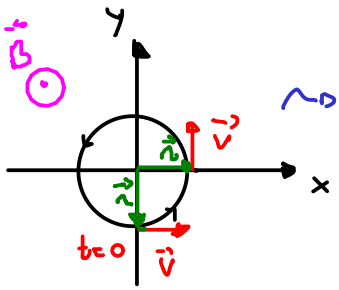
↝ Mov. circular uniforme se $v_z(0) = 0$ ($z = cte$)

↝ Mov. helicoidal se $v_z(0) \neq 0$ ($z = z_0 + v_z t$)

$v_z(0) = 0 \Rightarrow$



$\Rightarrow$

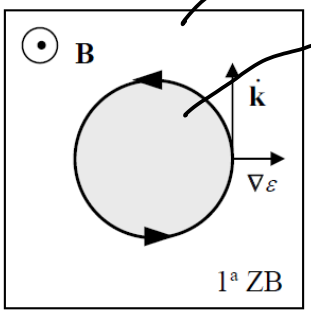


↝ sentido anti-horário.

↝ O que mudaria se $\vec{B} = B\hat{y}$? => ver lista!

↳ O exemplo acima ilustra um tipo particular de órbita, conhecida como órbita de elétron.

↳ Para elétrons na superfície de Fermi, este tipo de órbita ocorre quando esta superfície não cruza as bordas da ZB (planos de Bragg).



→ estados vazios

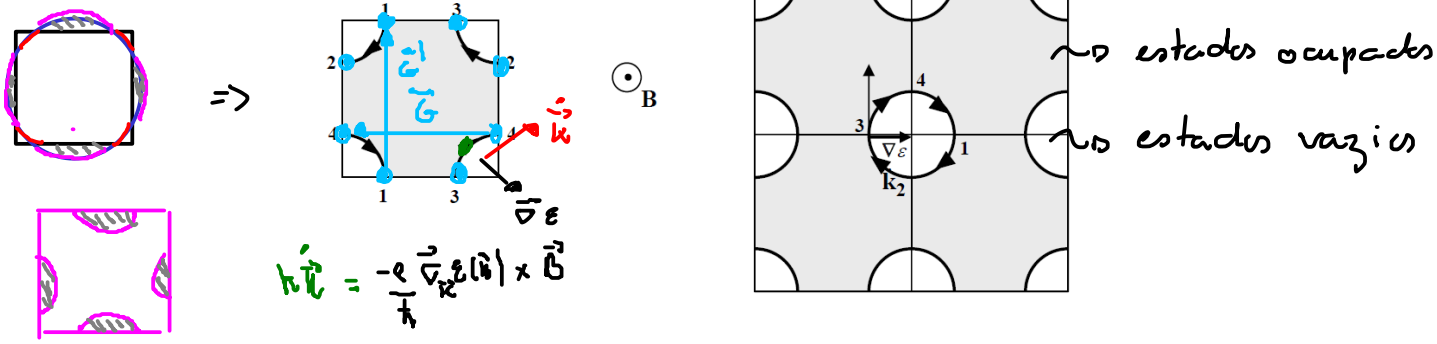
→ estados ocupados

→ situação comum em metais alcalinos.

Outras órbitas:

→ órbitas de buraco

Ocorrem quando a sup. de Fermi cruza as bordas da ZB.



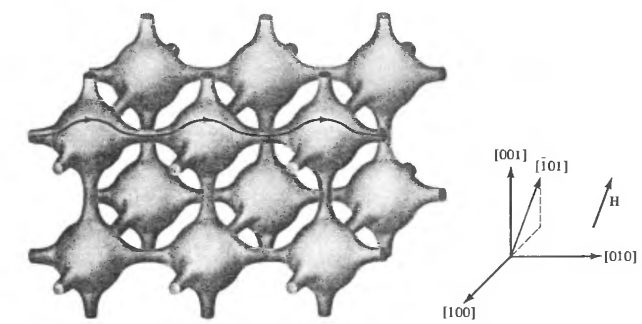
→ estados ocupados

→ estados vazios

→ Eletrão gira em sentido horário => se comporta como partícula de carga positiva => buracos!

→ Situação comum em metais bivalentes e trivalentes (ex: alcalinos terrosos, Al) => $R_H > 0$ no ef. Hall está associado a estes ramos da sup. de Fermi!

→ órbitas abertas



=>

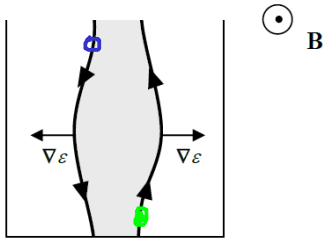


Figure 12.8
Representation in the repeated-zone scheme of a constant-energy surface with simple cubic symmetry, capable of giving rise to open orbits in suitably oriented magnetic fields. One such orbit is shown for a magnetic field parallel to [101]. For another example occurring in real metals, see page 292.

⇝ Forma "afanilada" das sups. de ε = cte surge devido ao cruzamento c/ os planos de Bragg.

Obs: Caso queira ler + detalhes sobre o efeito Hall no formalismo semi-clássico, veja o cap. 12 do Ashcroft.

Referências:

Ashcroft - cap. 1 (modelo de Drude)
cap. 12 (teoria semi-clássica)

Kittel - cap. 6 (modelo de Drude)
caps. 8 e 9 (teoria semi-clássica)

Apostila do prof. Capaz - cap. 6.