

Modelo de Drude

El modelo de Drude es la aproximación clásica para describir el gas de electrones libres. A pesar de su sencillez, da predicciones cualitativamente correctas de muchas de sus propiedades tales como la conductividad óptica. Por otro lado, propiedades de transporte como el poder termoeléctrico es dos órdenes de magnitud más grande que el observado y el signo del coeficiente Hall es siempre negativo a diferencia de lo que se observa en algunos metales. Predice, incorrectamente, caminos libres medios comparables al parámetro de la red del cristal (consistente con la idea de Drude de que los iones son los responsables de las colisiones de los electrones).

A pesar de sus deficiencias y debido a su simplicidad sigue siendo el modelo de referencia para analizar las propiedades de materiales con propiedades no-convencionales.

Modelo de Sommerfeld

Es la versión cuántica del gas de electrones libres que incorpora el principio de exclusión de Pauli, dando lugar al gas de electrones degenerado tal y como se realizó en el átomo. La función de distribución clásica de Maxwell-Boltzmann del modelo de Drude se reemplaza por la distribución de Fermi-Dirac en el modelo cuántico que introduce la energía de Fermi como la escala nueva de energía que domina las propiedades electrónicas incluso a temperatura ambiente ya que es mucho más pequeña que la temperatura de Fermi. Esto hace que el camino libre medio de los electrones del gas cuántico sea dos órdenes de magnitud más grande que el parámetro de red, en contra de las predicciones del modelo de Drude.

A pesar de ello, este modelo todavía seguía sin explicar dos observaciones importantes. Por un lado, la existencia de aislantes y por otro el signo positivo del coeficiente Hall observado en muchos metales.

Teorema de Bloch

En los dos modelos anteriores sólo se considera la contribución electrónica a la energía sin tener en cuenta la presencia de la red cristalina. Bloch encontró la solución a la ecuación de Schrödinger que incluye la periodicidad de la red iónica. Encontró que la función de onda debe satisfacer que sea un autoestado simultáneo del operador traslación (por un vector de la red Bravais) y del hamiltoniano. La función de onda resultante es de una gran simplicidad y predice que los electrones se mueven dentro del sólido sin colisiones debido al efecto túnel. El teorema de Bloch es la base sobre la que se sustenta toda la teoría de bandas, la cual permite obtener una descripción detallada de la estructura electrónica de distintos materiales y predecir sus propiedades. En particular, permite explicar porque algunos sistemas son metálicos, otros aislantes y otros semiconductores.

Modelo de Dulong y Petit

Los modelos anteriores son incapaces de resolver dos observaciones fundamentales en los sólidos: (i) la resistividad es finita en los cristales reales, (ii) el calor específico de los metales no es proporcional a la temperatura para cualquier temperatura, (iii) la conductividad térmica en los aislantes es diferente de cero a pesar de que existe un gap en las excitaciones electrónicas. Estas observaciones obligaron a tener en cuenta la dinámica de la red en la descripción del sólido.

El modelo de Dulong y Petit describe de forma clásica la dinámica de una red de iones con desplazamientos pequeños (aproximación armónica). Predice un comportamiento constante del calor específico con la temperatura tal y como se observa en muchos sólidos pero sólo a temperaturas suficientemente altas. A temperaturas bajas el calor específico se va a cero al disminuir la temperatura, hecho que es imposible de explicar sin un tratamiento cuántico de las vibraciones de la red.

Modelo de Debye

Debye introdujo un modelo para corregir las deficiencias del modelo clásico de Dulong y Petit y poder describir todo el rango de temperaturas. La cuantización de las vibraciones se puede interpretar en términos de una nueva partícula, el fonón, que satisface la estadística de Bose-Einstein en lugar de la de Fermi-Dirac. El tratamiento cuántico de la red introduce también una nueva escala de temperaturas, la escala de Debye, que es mucho menor que la escala asociada con la energía de Fermi del metal. A temperaturas por debajo de la escala de Debye, los efectos cuánticos dominan las propiedades termodinámicas dando lugar a un calor específico que es proporcional al cubo de la temperatura tal y como se observa experimentalmente. En definitiva, un tratamiento cuántico del sólido recupera tanto el límite de temperatura alta clásico como el de temperatura baja cuántico que se observa experimentalmente.

Interacción electrón-electrón

Hasta el momento hemos despreciado la interacción entre los electrones dentro del sólido. En metales convencionales esta interacción es débil. Aún así se encuentra en un tratamiento de campo medio de tipo Hartree-Fock que existen efectos puramente cuánticos de intercambio que dan contribuciones a la energía comparables a la energía cinética de los metales típicos. El hecho de que podamos despreciar la interacción electrón-electrón en metales se debe al importante fenómeno de apantallamiento a raíz del cual la interacción Coulomb efectiva dentro del metal se reduce fuertemente debido a la presencia del resto de los electrones.

Landau introdujo el concepto de cuasipartícula (entes complejos compuestos por electrones que acarrearán una nube electrónica debido a la interacción Coulomb) para describir las excitaciones en el líquido de Fermi. Esta teoría permite describir metales y He3 como un conjunto de cuasipartículas que interactúan débilmente.

