

**PONTIFICA UNIVERSIDAD  
CATÓLICA DEL PERÚ**

**FACULTAD DE CIENCIAS E INGENIERÍA**



Revisión teórica de la aproximación de medio efectivo y la transición de Mott para la descripción de las propiedades ópticas y eléctricas de materiales semiconductores

Trabajo de investigación para obtener el grado de Bachiller en CIENCIAS CON MENCIÓN en Física presentada por:

***Daniel Joel Abal Chavez***

Asesor:

***Jorge Andres Guerra Torres***

Lima, 2021

## Resumen

Los semiconductores son materiales que tienen propiedades intermedias entre los conductores y aislantes. Sus propiedades eléctricas pueden modificarse mediante dopaje o la aplicación de campos eléctricos. Es por eso que diseñadores e investigadores buscan conocer con precisión sus propiedades ópticas y eléctricas para su aplicación en la industria. En este trabajo se propone una revisión teórica del modelo clásico de Drude para describir la contribución de los electrones libres en la permitividad eléctrica. Además, se estudia el modelo de Drude-Lorentz para explicar la transmisión de la luz cuando interactúa con medios dieléctricos. Asimismo, se describe la transición de Mott para justificar la conductividad eléctrica de óxidos metálicos como el ITO. Adicionalmente, se plantea la revisión teórica de medios efectivos para la caracterización de propiedades eléctricas en capas rugosas de semiconductores. Este resultado se generaliza cuando las rugosidades son demasiado abruptas. La descripción teórica de este trabajo ha sido acompañada con el uso del software Wolfram Mathematica. Esta herramienta ha sido utilizada principalmente para la creación de gráficos y para la solución de ecuaciones. Con este trabajo se busca sentar las bases para un estudio más detallado sobre las propiedades eléctricas y ópticas de algún material semiconductor en concreto.

# Índice General

<b>Resumen</b>	<b>i</b>
<b>Índice general</b>	<b>ii</b>
<b>Índice de figuras</b>	<b>iv</b>
<b>Índice de cuadros</b>	<b>viii</b>
<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
<b>2. Modelo de Drude</b>	<b>3</b>
2.1 Suposiciones básicas del modelo de Drude.....	3
2.2 Conductividad eléctrica DC de un metal.....	4
2.3 Efecto Hall y magnetoresistencia.....	9
2.4 Conductividad eléctrica AC de un metal.....	11
2.4.1 Respuesta a baja frecuencia.....	12
2.4.2 Respuesta a alta frecuencia.....	13
2.4.3 Frecuencia de plasma.....	14
2.5 Conductividad térmica de un metal.....	16
2.6 Modelo de Drude-Lorentz.....	23
2.6.1 Interpretación del modelo Drude-Lorentz.....	27
<b>3. Transición de Mott</b>	<b>40</b>
3.1 Clasificación de metales y aislantes.....	40
3.2 <i>Gap criterion</i> para aislante.....	42
3.3 <i>Electrostatic Screening</i> en un gas de Fermi.....	43
<b>4. Aproximación de medio efectivo</b>	<b>48</b>

4.1 Campo eléctrico interno.....	48
4.2 Polarización.....	51
4.3 Permitividad eléctrica relativa (1 Material, en el vacío).....	52
4.4 Permitividad eléctrica relativa (2 materiales, en el vacío).....	53
4.5 Permitividad eléctrica relativa (N Materiales, en un medio $\epsilon_h$ ).....	55
4.6 Fórmula única para 2 medios materiales.....	59
<b>5. Modelado de superficie rugosa</b>	<b>64</b>
5.1 Rugosidad.....	64
5.2 EMA en capas rugosas.....	65
5.3 <i>Atomic Force Microscopy</i> (AFM).....	68
5.4 EMA-multicapas.....	70
<b>6. Conclusiones</b>	<b>73</b>
<b>Bibliografía</b>	<b>74</b>

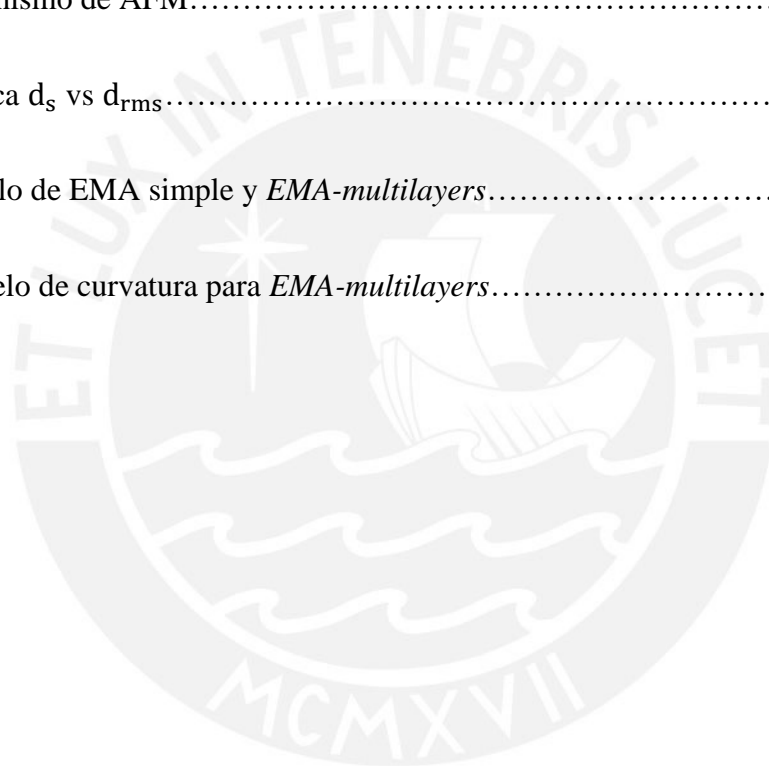
# Índice de Figuras

	pág.
Figura 1 Representación del experimento de Hall .....	9
Figura 2 Modelo físico del modelo de Drude-Lorentz.....	23
Figura 3 Gráfica de $w$ vs $\epsilon_1$ .....	25
Figura 4 Gráfica de $w$ vs $\epsilon_2$ .....	25
Figura 5 Gráficas de $\epsilon_1$ y $\epsilon_2$ obtenidas de la literatura.....	26
Figura 6 Transmisión de la luz en una placa atómica bidimensional hipotética.....	27
Figura 7 Gráfica fasorial de $E(A_1)$ en el plano complejo.....	28
Figura 8 Radiación generada por un dipolo y gráfica del campo eléctrico a través del tiempo.....	29
Figura 9 Gráfica fasorial de los campos producidos por las 3 primeras áreas de la placa atómica bidimensional.....	29
Figura 10 Gráfica fasorial de los campos producidos por todas las áreas de la placa atómica bidimensional.....	30
Figura 11 Gráfica $w$ vs $\delta_{dip}$ elaborada de Wolfram Mathematica .....	31
Figura 12 Gráfica $w$ vs $\delta_{dip}$ obtenida de la literatura.....	31
Figura 13 Gráfica de $\delta_{dip}$ y $\delta_{plate}$ obtenida de la literatura.....	32
Figura 14 Gráfica de $w$ vs $ a_{dip} $ elaborado en Wolfram Mathematica.....	32
Figura 15 Gráfica de $w$ vs $ a_{dip} $ obtenida de la literatura.....	33

Figura 16 Espectro $\epsilon_1$ del modelo de Lorentz y los 5 puntos a interpretar.....	34
Figura 17 Espectro $\delta_t$ según el modelo de Lorentz para un placa bidimensional elaborado en Wolfram Mathematica.....	35
Figura 18 Espectro $\epsilon_1$ y $\delta_t$ según el modelo de Lorentz para un placa bidimensional hipotética elaborado en Wolfram Mathematica.....	36
Figura 19 Espectro de $ E_t $ según el modelo de Lorentz para un placa bidimensional hipotética elaborado en Wolfram Mathematica.....	36
Figura 20 Espectro $\epsilon_2$ y $ E_t $ según el modelo de Lorentz para un placa bidimensional hipotética elaborado en Wolfram Mathematica.....	37
Figura 21 Espectro $\delta_t$ y $ E_t $ obtenido de la literatura.....	37
Figura 22 Representación de la luz reflejada para un medio cuando $w \ll w_0$ .....	38
Figura 23 Representación de la luz reflejada para un medio cuando $w \gg w_0$ .....	39
Figura 24 Efectos de la perturbación local $\delta U$ en un gas de Fermi de electrones libres.....	44
Figura 25 Esfera dieléctrica no polarizada y polarizada.....	48
Figura 26 Esfera dieléctrica dentro de un capacitor.....	48
Figura 27 Esquema de esfera dieléctrica con carga arbitraria $\Delta q$ .....	49
Figura 28 Esquema de esfera dieléctrica con 2 cargas arbitrarias $\Delta q$ diametralmente opuestas.....	50
Figura 29 Esquema de esfera dieléctrica compuesta de 2 materiales distintos.....	53
Figura 30 Esquema de esfera dieléctrica rodeada de un material dieléctrico.....	56
Figura 31 Esquema de un condensador con dieléctrico en paralelo y su fórmula.....	59

Figura 32 Esquema de un condensador con dieléctrico en serie y su fórmula.....	60
Figura 33 Esquema de un condensador, una esfera dieléctrica compuesta de 2 materiales y la fórmula de EMA.....	60
Figura 34 Gráfica $\epsilon$ vs $f_B$ para condensadores en paralelo ( $q = 0$ ), serie ( $q = 1$ ) y EMA ( $q = \frac{1}{3}$ ) cuando $\epsilon_A = 2$ y $\epsilon_B = 4$ elaborado en Wolfram Mathematica.....	61
Figura 35 Resolución de la ecuación (4.50) cuando $\epsilon_A = 2$ , $\epsilon_B = 4$ , $\epsilon_h = \epsilon$ y para un $k$ arbitrario elabora en Wolfram Mathematica.....	62
Figura 36 Gráfica de la solución de la ecuación (4.50) cuando $\epsilon_A = 2$ , $\epsilon_B = 4$ , $\epsilon_h = \epsilon$ y $q$ variando desde 0.1 a 0.9 en pasos de 0.1 elaborado en Wolfram Mathematica.....	62
Figura 37 Rugosidad macroscópica y dispersión de la luz.....	64
Figura 38 Rugosidad microscópica.....	64
Figura 39 Aproximación de capa rugosa con EMA.....	65
Figura 40 Imagen de la aproximación de la capa rugosa.....	65
Figura 41 Solución computacional de la ecuación (5.1) elaborado en Wolfram Mathematica.....	65
Figura 42 Solución computacional de la ecuación (4.38) elaborado en Wolfram Mathematica.....	66
Figura 43 Solución computacional de la ecuación (4.50) usando Wolfram Mathematica.....	66
Figura 44 Solución computacional de la ecuación (4.37) elaborado en Wolfram Mathematica.....	67

Figura 45 Gráfica del índice de refracción de la fase rugosa para una mezcla de $\text{SiO}_2$ y $\text{TiO}_2$ usando los modelos MG y EMA elaborado en Wolfram Mathematica.....	67
Figura 46 Gráfica del índice de refracción real de la fase rugosa para una mezcla de Aire y Silicio elaborado en Wolfram Mathematica.....	68
Figura 47 Gráfica del coeficiente de extinción de la fase rugosa para una mezcla de Aire y Silicio elaborado en Wolfram Mathematica.....	68
Figura 48 Mecanismo de AFM.....	69
Figura 49 Gráfica $d_s$ vs $d_{\text{rms}}$ .....	70
Figura 50 Modelo de EMA simple y <i>EMA-multilayers</i> .....	70
Figura 51. Modelo de curvatura para <i>EMA-multilayers</i> .....	71





## Índice de Tablas

pág.

Tabla 1 Comportamiento de $\delta t$ en 5 puntos.....	34
---	----



# 1. Introducción

Un material semiconductor varía sus propiedades ópticas y eléctricas a través de inclusiones o campos eléctricos. Es en la búsqueda del control de estas propiedades que nace la propuesta de modelos que permitan describir la estructura interna de materiales semiconductores. Uno de los modelos clásicos para la descripción de conductividad eléctrica es el Modelo de Drude. Este modelo está limitado a medir la contribución de los electrones libres. Los modelos cuánticos ya toman en consideración la contribución de las redes cristalinas. Aun así, este modelo sigue siendo útil pues en ciertas regiones del espectro de luz predomina la conducción de los electrones libres. Asimismo, se estudia el modelo de Drude-Lorentz. Este modelo es un poco más general que el modelo de Drude pues en su descripción del movimiento de dipolos aparece un factor de “viscosidad”, término que no aparecía en el modelo de Drude. Este también es un modelo clásico que presenta limitaciones, aunque permite describir perfectamente la transmisión de la luz en medios transparentes, medios donde domina la contribución de los electrones libres. Asimismo, se estudia la Transición de Mott. Este no es el único tipo de transición metal-aislante que existe pero es el único que toma en cuenta la interacción electrón-electrón. Es por eso que es útil para describir las propiedades de materiales que presentan inclusiones, como el ITO. Por otro lado, en el estudio de las propiedades eléctricas de semiconductores no se puede dejar de lado las propiedades eléctricas y ópticas de las rugosidades de una superficie. Generalmente estas rugosidades se modelan con *Effective Medium Approximation* (EMA), pero plantear dicha aproximación tiene algunas limitaciones. La principal es que la rugosidad debe ser aproximadamente la décima parte de la longitud de onda incidente. Cuando esto no se cumple, las predicciones del modelo comienzan a fallar. Es por eso que se plantea un modelo adicional: *EMA-multilayer*. Este es un modelo que toma como base la aproximación de EMA simple y separa toda la rugosidad en varias capas. Esta

aproximación requiere de un modelo estructural para su aplicación. Asumir una geometría para la rugosidad permite descifrar la fracción volumétrica de cada capa.



## 2. Modelo de Drude

Drude formuló su teoría sobre conducción eléctrica y térmica aplicando la teoría cinética de gases a los metales (gas de electrones). Aunque la teoría cinética de gases considera que las moléculas de gas son esferas sólidas idénticas, se debe asumir al menos dos tipos de esferas cuando se habla de los metales, pues los electrones están cargados negativamente y el metal es eléctricamente neutro. Cuando aún no se sabía nada sobre el origen de la luz, los protones y los electrones móviles, Drude asumió que las cargas positivas estaban relacionadas con partículas muy pesadas que permanecían inmóviles y que las cargas negativas podían desprenderse del átomo y de esta manera deambular libremente por el metal [1].

### 2.1 Suposiciones básicas del modelo de Drude

Las suposiciones básicas del modelo de Drude son las siguientes:

- 1.- En medio de cada colisión, se desprecian las interacciones electrón-electrón y electrón-ion. Si no hay un campo eléctrico, los electrones se mueven uniformemente en líneas rectas. En la presencia de campos externos, los electrones obedecen la segunda ley de Newton despreciando los complicados campos adicionales producidos por otros electrones e iones.
  - 2.- Las colisiones ocurren instantáneamente y alteran la velocidad de un electrón de forma abrupta. Drude asumió que los electrones rebotaban debido a que los núcleos de los iones eran impenetrables.
  - 3.- Los electrones experimentan una colisión con una probabilidad por unidad de tiempo de  $\frac{1}{\tau}$ .
- A partir de esta suposición, se deduce que un electrón, elegido al azar, viaja en promedio un tiempo  $\tau$  antes de experimentar su próxima colisión.

4.- Los electrones logran el equilibrio térmico con su entorno a través de las colisiones. Además, los electrones que colisionan en las regiones más calientes emergerán con mayores velocidades.

## 2.2 Conductividad eléctrica DC de un metal

En esta sección se busca estimar el tamaño de la resistividad eléctrica en un cable de longitud  $L$ , área transversal  $A$  y por el que fluye una corriente uniforme  $I$ . La resistividad  $\rho$  es definida como una constante de proporcionalidad entre el campo eléctrico  $E$  y la densidad de corriente  $j$ .

$$E = \rho j \quad (2.1)$$

Aquí, la densidad de corriente  $j$  es un vector paralelo al flujo de carga, cuya magnitud es la cantidad de carga por unidad de tiempo cruzando sobre una unidad de área perpendicular al flujo eléctrico. Para estimar su valor, se usa la definición de corriente eléctrica:

$$I = \oint j \cdot dS \quad (2.2)$$

Como la densidad de corriente  $j$  es constante y paralelo a  $dS$ , la densidad de corriente puede salir de la integral y resolviendo se obtiene que  $j = \frac{I}{A}$ . Se sabe también que el potencial en un cable está dado por  $V = d E$  donde  $V$  es la caída de potencial y “d” es la longitud del cable, entonces para nuestro alambre la caída de potencial es  $V = L E$ . Reemplazando  $V$  y  $j$  en (2.1), obtenemos:

$$V = \frac{L \cdot \rho \cdot I}{A} \quad (2.3)$$

Vinculando la Ley de Ohm ( $V = I R$ ) con la ecuación anterior, obtenemos que la resistencia eléctrica es  $R = \frac{L \cdot \rho}{A}$ .

Por otro lado, la corriente es constante así que todos los electrones se moverán a una misma velocidad  $v$ . Luego de un tiempo  $dt$ , los electrones avanzan una distancia  $dl = v \cdot dt$ . Si definimos los portadores de carga  $n$  como la cantidad de electrones por unidad de volumen, entonces los electrones que cruzan el área transversal  $A$ , en el tiempo infinitesimal  $dt$ , son:

$$\frac{dN}{dV} = n \quad (2.4)$$

$$dN = n \cdot dV \quad (2.5)$$

$$dN = n \cdot dl \cdot A \quad (2.6)$$

$$dN = n \cdot (v \cdot dt) \cdot A \quad (2.7)$$

Además, como cada uno de los electrones lleva una carga  $-e$ , la carga total cruzando el área  $A$  será  $dq = (-e) \cdot n \cdot (v \cdot dt) \cdot A$ . Por lo tanto, la corriente en el alambre es de  $I = -e \cdot n \cdot v \cdot A$  y reemplazando en  $j = \frac{I}{A}$  se obtiene:

$$-e \cdot n \cdot v = j \quad (2.8)$$

En cualquier punto de un metal, los electrones siempre se mueven en una variedad de direcciones. En la ecuación (2.8) la velocidad  $v$  es en realidad la velocidad promedio electrónica. En ausencia de un campo eléctrico, los electrones se mueven direcciones aleatorias, así que la velocidad promedio es 0. Es por eso que no hay densidad de corriente neta. Sin embargo, en presencia de un campo  $E$ , sí hay una velocidad media dirigida en dirección opuesta al campo. Para calcular esta velocidad, tomemos un electrón aleatorio a tiempo cero. Sea  $t$  el tiempo transcurrido desde su última colisión y  $v_0$  su velocidad inicial. Entonces, con física Newtoniana, descubrimos que su velocidad aumenta en  $\frac{-e \cdot E \cdot t}{m}$ .

$$\Delta \text{momentum} = \text{Impulso} \quad (2.9)$$

$$p_f - p_0 = \text{Fuerza} \cdot \Delta t \quad (2.10)$$

$$m \cdot v_f - m \cdot v_0 = \text{Fuerza del campo eléctrico} \cdot (t - 0) \quad (2.11)$$

$$m \cdot (v_f - v_0) = (q \cdot E) \cdot t \quad (2.12)$$

$$v_f - v_0 = \frac{-e \cdot E \cdot t}{m} \quad (2.13)$$

$$v_f = v_0 + \frac{-e \cdot E \cdot t}{m} \quad (2.14)$$

Dado que suponemos que el electrón emerge de una colisión aleatoria, no habrá contribución de  $v_0$  a la velocidad electrónica promedio y, por lo tanto, solo depende del término  $\frac{-e \cdot E \cdot t}{m}$ . Por el postulado 3, los electrones viajan en promedio un tiempo  $\tau$ , entonces la velocidad promedio es:

$$v_{avg} = \frac{-e \cdot E \cdot \tau}{m} \quad (2.15)$$

Reemplazando la ecuación (2.15) en (2.8) se obtiene que la densidad de corriente es  $j = \frac{e^2 \cdot n \cdot \tau}{m} E$ . Comparando este resultado con la ecuación (2.1) se consigue finalmente la resistividad eléctrica y la conductividad eléctrica ( $\sigma = \frac{1}{\rho}$ ).

$$\rho = \frac{m}{e^2 \cdot n \cdot \tau}, \quad \sigma = \frac{e^2 \cdot n \cdot \tau}{m} \quad (2.16)$$

Antes de pasar a la siguiente sección, se hallará la ecuación de movimiento de cada electrón según el modelo de Drude. Primero se modifica la ecuación (2.8) multiplicando y dividiendo por la masa “m”. Nos queda lo siguiente:

$$\frac{-e \cdot n \cdot p(t)}{m} = j \quad (2.17)$$

Aquí,  $p(t)$  representa el momento lineal promedio (recordar que  $v$  representaba la velocidad promedio). Entonces, asumiendo que el sistema está compuesto por  $N$  electrones, cada uno con su propio momento lineal, la configuración de momentos lineales será la siguiente:

$$p_1(t), p_2(t), p_3(t), \dots, p_N(t) \text{ con } p(t) = \frac{\sum_1^N p_i(t)}{N} \quad (2.18)$$

De la tercera suposición del modelo de Drude se concluye que la probabilidad de que un electrón colisione en el intervalo de  $t$  hasta  $t + dt$  es de  $\frac{dt}{\tau}$ . Entonces, de los  $N$  electrones,  $\frac{dt}{\tau} N$  colisionan y los restantes  $(1 - \frac{dt}{\tau}) N$  no colisionan. Para una mejor representación, se forman 2 grupos (electrones que colisionan y no colisionan), se cambian las etiquetas y se asume que el momento promedio de cada grupo es proporcional a su nueva cantidad de elementos.

$$p_1(t), p_2(t), p_3(t), \dots, p_{\frac{dt}{\tau} N}(t) \text{ con } p_{avg}(t) = \left(\frac{dt}{\tau}\right) \cdot p(t) \quad (\text{Colisionan})$$

$$p'_1(t), \dots, p'_{(1-\frac{dt}{\tau})N}(t) \text{ con } p'_{avg}(t) = \left[\left(1 - \frac{dt}{\tau}\right)\right] \cdot p(t) \quad (\text{No colisionan})$$

Por un lado, los electrones que colisionan entre  $t$  hasta  $t + dt$  cambian aleatoriamente su velocidad inicial. Luego, comienzan a aumentar su momento debido a una fuerza externa  $f$ , que puede ser producido por un campo eléctrico, por ejemplo. Para el instante  $t + dt$  la configuración de momentos es la siguiente:

$$p^*_1 + f \cdot \Delta t_1, p^*_2 + f \cdot \Delta t_2, p^*_3 + f \cdot \Delta t_3, \dots, p^*_{\frac{dt}{\tau} N} + f \cdot \Delta t_{\frac{dt}{\tau} N} \quad (\text{Colisionan})$$

Donde  $p^*_1, p^*_2, p^*_3, \dots, p^*_{\frac{dt}{\tau} N}$  son los momentos aleatorios luego de cada choque

Observaciones:

- El aumento del momento debido a una fuerza externa ya fue tratado anteriormente (ecuación 2.9).
- Sabemos que cada uno de los electrones colisiona entre  $t$  y  $t + dt$ , pero no sabemos exactamente cuándo ocurre la colisión, por eso cada electrón tiene asociado su propio  $\Delta t$ . Aún así, se debe cumplir que  $\Delta t_1, \Delta t_2, \Delta t_3, \dots, \Delta t_{\frac{dt}{\tau} N} \leq dt$ . Para las



aproximaciones siguientes, asumiremos el caso más extremo, esto es  $\Delta t_1 = \Delta t_2 = \Delta t_3 = \dots = \Delta t_{\frac{dt}{\tau} N} = dt$ .

- Los momentos  $p^*_1, p^*_2, p^*_3, \dots, p^*_{\frac{dt}{\tau} N}$  netamente no contribuyen a aumentar el momentum del sistema. Por eso pueden despreciarse.

Siguiendo las observaciones, todos los electrones que sí colisionan adquieren un mismo momento lineal igual a  $f \cdot dt$ .

$$p_1(t + dt) = p_2(t + dt) = p_3(t + dt) = \dots = p_{\frac{dt}{\tau} N}(t + dt) = f \cdot dt \text{ (Colisionan)}$$

Por otro lado, los electrones que no colisionan aumentan su momento lineal debido a la fuerza externa  $f$  durante todo el intervalo  $\Delta t$ . La configuración de momentos sería la siguiente:

$$p'_1(t) + f \cdot dt, p'_2(t) + f \cdot dt, p'_3(t) + f \cdot dt, \dots, p'_{(1-\frac{dt}{\tau})N}(t) + f \cdot dt \text{ (No colisionan)}$$

Resumiendo los resultados de cada caso, nos queda lo siguiente:

$$p_i(t + dt) = f \cdot dt \text{ para } i = 1, \dots, \frac{dt}{\tau} N \text{ (Colisionan)}$$

$$p'_j(t + dt) = p'_j(t) + f \cdot dt \text{ para } j = 1, \dots, \left(1 - \frac{dt}{\tau}\right) N \text{ (No colisionan)}$$

Con estos resultados, se calcula el momento lineal promedio de todo el sistema:

$$p(t + dt) = \frac{\sum_1^{\frac{dt}{\tau} N} p_i(t+dt) + \sum_1^{\left(1-\frac{dt}{\tau}\right)N} p'_j(t+dt)}{N} \quad (2.19)$$

$$p(t + dt) = \frac{\sum_1^{\frac{dt}{\tau} N} (f \cdot dt) + \sum_1^{\left(1-\frac{dt}{\tau}\right)N} (p'_j(t) + f \cdot dt)}{N} \quad (2.20)$$

$$p(t + dt) = \frac{(f \cdot dt) \cdot \frac{dt}{\tau} N + N p'_{avg}(t) + \left[\left(1 - \frac{dt}{\tau}\right) N\right] \cdot (f \cdot dt)}{N} \quad (2.21)$$

$$\frac{dp(t)}{dt} = -\frac{p(t)}{\tau} + f(t) \quad (2.22)$$

Esta ecuación establece un factor de amortiguamiento producto de la colisión entre los electrones y los iones positivos pesados. Ahora, esto se aplicará a diferentes casos.

### 2.3 Efecto Hall y Magnetoresistencia

En 1879, E.H. Hall trató de determinar si la fuerza originada por un campo magnético sobre un cable conductor se ejercía sobre todo el cable o solo sobre los portadores de cargas. Él sospechaba que era lo último y su experimento se basaba en el siguiente argumento: “Si la corriente eléctrica en un cable conductor es atraído por un imán, la corriente se amontonará sobre un lado del cable, menguando el flujo de corriente y, por lo tanto, aumentando la resistencia eléctrica”. Sus esfuerzos por detectar esta resistencia adicional no fueron exitosas, así que se replanteó el experimento. El amontonamiento de la corriente hacia un lado del cable generaría un estado de estrés transversal que sería medido como voltaje. E.H. Hall sí fue capaz de observar este voltaje [1].

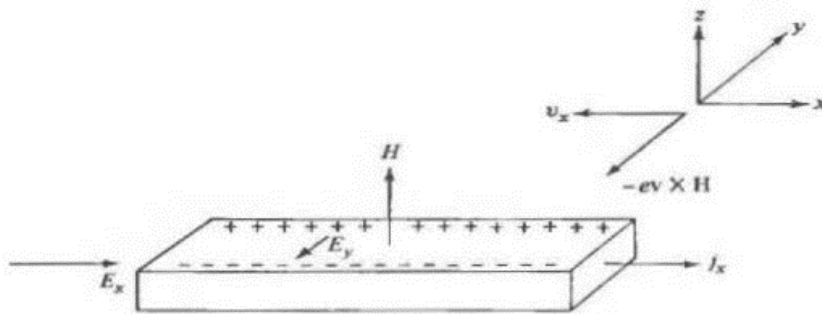


Figura 1. Representación del experimento de Hall [1].

Del esquema de la Figura 1 notamos que la fuerza de Lorentz es el agente que hace que las cargas se amontonen en extremos opuestos. Sin embargo, los electrones no pueden moverse demasiado lejos en la dirección y. Están limitados por las paredes del alambre. Además, mientras se acumulan allí, se empieza a formar un campo eléctrico en y que se opone a su movimiento. En el equilibrio, este campo transversal o campo Hall equilibra la fuerza de Lorentz y la corriente fluye solo en la dirección “x” [1].

En este tema, hay 2 cantidades de interés: La magnetoresistencia y el coeficiente de Hall. Por un lado, la magnetoresistencia es definida como la proporción entre el campo eléctrico  $E_x$  y la densidad de corriente  $j_x$ . Hall encontró que esta magnetoresistencia es independiente del campo magnético  $H$ .

$$\rho(H) = \frac{E_x}{j_x} \quad (2.23)$$

Por otro lado, el coeficiente de Hall es el factor de proporcionalidad entre el campo  $E_y$  y el producto  $j_x * H$ . Entonces:

$$R_H = \frac{E_y}{j_x H} \quad (2.24)$$

Para calcular el coeficiente de Hall, utilizamos la ecuación (2.22). La fuerza  $f$  es la fuerza de Lorentz y tiene un valor igual a  $f = -e \left( E + p \times \frac{H}{m c} \right)$ . Reemplazando se obtiene:

$$\frac{dp(t)}{dt} = -\frac{(p_x(t), p_y(t), 0)}{\tau} - e [(E_x, E_y, 0) + (p_x(t), p_y(t), 0) \times \frac{(0, 0, H)}{m c}] \quad (2.25)$$

En el estado estable, la corriente es independiente del tiempo, entonces  $\frac{dp(t)}{dt} = 0$ . Además, tomando los parámetros  $\sigma_0 = \frac{e^2 \cdot n \cdot \tau}{m}$ ,  $j = -e \cdot n \cdot v$  y  $w_c = \frac{E \cdot H}{m c}$ , desprendemos el siguiente par de ecuaciones:

$$\sigma_0 E_x = w_c \cdot \tau \cdot j_y + j_x \quad (2.26)$$

$$\sigma_0 E_y = -w_c \cdot \tau \cdot j_x + j_y \quad (2.27)$$

Asimismo, cuando las cargas comienzan a estabilizarse, ya no hay un movimiento de cargas transversales, entonces  $j_y = 0$ . Reemplazando en (2.27) se obtiene:

$$\sigma_0 E_y = -w_c \cdot \tau \cdot j_x \quad (2.28)$$

De este último resultado se desprende el valor del coeficiente de Hall.

$$R_H = \frac{-1}{n \cdot c \cdot e} \quad (2.29)$$

Es un resultado sorprendente, en el sentido que el coeficiente de Hall depende únicamente de los portadores de carga. En la práctica, el coeficiente de Hall depende del campo magnético, la temperatura o de cómo la muestra fue preparada. Aun así, a muy bajas temperaturas, en muestras puras y a campos magnéticos altos sí se cumple esta relación [1].

## 2.4 Conductividad eléctrica AC de un metal

El modelo de Drude también permite entender en términos simples el efecto de las cargas libres en semiconductores y metales. Para eso, se reutiliza la ecuación (2.22) con  $f = -e \cdot E_0 e^{-i\omega t}$  y  $p = m v$ .

$$m \frac{d v(t)}{dt} = -\frac{m \cdot v(t)}{\tau} + -e \cdot E_0 e^{-i\omega t} \quad (2.30)$$

Aquí  $\tau$  es el tiempo de relajación y el campo eléctrico es una sinusoidal dependiente del tiempo. Si asumimos que la velocidad también adopta un comportamiento sinusoidal, es decir, es de la forma  $v = v_0 e^{-i\omega t}$  y lo reemplazamos en la anterior ecuación, obtenemos la siguiente relación:

$$\frac{(-mi\omega + \frac{m}{\tau})v_0}{e} = E_0 \quad (2.31)$$

Con esta relación, se calculará la conductividad eléctrica. Por un lado, la densidad de corriente  $j$  guarda relación con la velocidad promedio  $v_0$  y la densidad de cargas  $n$  (ecuación 2.8). Por otro lado, si se asume que la conductividad eléctrica es isotrópica, la densidad de corriente también guarda relación con el campo eléctrico  $j = \sigma E_0$ . Igualando ambas ecuaciones, encontramos que:

$$nev_0 = \sigma E_0 \quad (2.32)$$

Reemplazando el campo eléctrico  $E_0$  de la ecuación (2.32) en (2.31) se encuentra que la conductividad eléctrica es la siguiente:

$$\sigma = \frac{\sigma_0}{1-i\omega\tau} \quad \text{con} \quad \sigma_0 = \frac{ne^2\tau}{m} \quad (2.33)$$

En el Modelo de Drude, las cargas libres son los únicos agentes encargados de la conducción eléctrica. Sin embargo, el núcleo también contribuye a la conducción de electricidad. Esta contribución extra estará expresada en términos de la constante dieléctrica  $\epsilon_{core}$ . Así, la función dieléctrica total es:

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_{core}(\omega) + \frac{i\sigma}{\omega} \quad (2.34)$$

Sustituyendo la ecuación (2.33) en (2.34) obtenemos:

$$\epsilon = \epsilon_{core} + \frac{i}{\omega} \frac{ne^2\tau}{m(1-i\omega\tau)} = \epsilon_1 + i\epsilon_2 = \epsilon_0 (\tilde{n} + i\tilde{k})^2 \quad (2.35)$$

Con esta ecuación, describimos el comportamiento de la constante dieléctrica  $\epsilon$  en 3 casos particulares: A frecuencias altas, frecuencias bajas y frecuencias de plasma.

#### 2.4.1 Respuesta a baja frecuencia

A bajas frecuencias se cumple que  $\omega\tau \ll 1$ . Como  $\omega \rightarrow 0$ , la parte imaginaria de la función dieléctrica  $\epsilon$  es muy grande así que se puede ignorar la contribución del núcleo  $\epsilon_{core}(\omega)$ . Además, el denominador de la ecuación (2.35) es de la forma  $m\omega - i\omega^2\tau$ . Como la frecuencia  $\omega$  es muy pequeña, podemos ignorar el término cuadrático, quedando lo siguiente:

$$\epsilon(\omega) = i \frac{ne^2\tau}{m\omega} = \epsilon_0 (\tilde{n} + i\tilde{k})^2 \quad (2.36)$$

$$\sqrt{i} \sqrt{\frac{ne^2\tau}{\epsilon_0 m\omega}} = \tilde{n} + i\tilde{k} \quad (2.37)$$

Como  $\sqrt{i} = \frac{1}{2} + i\frac{1}{2}$ :

$$\tilde{n} = \tilde{k} = \sqrt{\frac{ne^2\tau}{2\varepsilon_0mw}} \quad (2.38)$$

La ecuación (2.38) evidencia que  $\tilde{n}$  y  $\tilde{k}$  son iguales y, como  $w \rightarrow 0$ , ambos coeficientes son grandes. Conocidos  $\tilde{n}$  y  $\tilde{k}$ , se calculará la reflectancia:

$$R = \frac{(\tilde{n}-1)^2 + \tilde{k}^2}{(\tilde{n}+1)^2 + \tilde{k}^2} \quad (2.39)$$

$$R = \frac{\tilde{n}^2 - 2\tilde{n} + 1 + \tilde{k}^2}{\tilde{n}^2 + 2\tilde{n} + 1 + \tilde{k}^2} \quad (2.40)$$

Como  $\tilde{n}, \tilde{k} \gg 1$ , podemos eliminar los “1” de la ecuación (2.40), quedando lo siguiente:

$$R = 1 - \frac{4\tilde{n}}{\tilde{n}^2 + 2\tilde{n} + \tilde{k}^2} \quad (2.41)$$

Como  $\tilde{n}$  y  $\tilde{k}$  son grandes y son iguales, se cumple que  $\tilde{n}^2, \tilde{k}^2 \gg \tilde{n}$ . Entonces se puede eliminar el “ $2\tilde{n}$ ” del denominador. Expresando todo en función de  $\tilde{n}$ , nos queda:

$$R = 1 - \frac{2}{\tilde{n}} \quad (2.42)$$

Como  $\tilde{n} \gg 1$ , el valor de la reflectancia es prácticamente 1. Así el modelo de Drude predice que a bajas frecuencias los materiales con una gran concentración de electrones libres (como los metales) son reflectores casi perfectos.

#### 2.4.2 Respuesta a alta frecuencia

A altas frecuencias se tiene que  $w\tau \gg 1$ . Si evaluamos esta aproximación en la ecuación (2.35) podemos dejar de lado el “1” del denominador porque “ $w\tau$ ” es mucho más grande.

Operando y simplificando se obtiene:

$$\mathcal{E}(w) = \mathcal{E}_{core}(w) - \frac{ne^2}{mw^2} \quad (2.43)$$

Notamos que el coeficiente  $\mathcal{E}$  es un número real puro. A medida que la frecuencia aumenta  $w \rightarrow \infty$ , la contribución de los portadores libres se vuelve insignificante  $\frac{ne^2}{mw^2} \rightarrow 0$ . Esto significa que otros procesos, como el de bandas, dominarán [4]. Así, para el caso  $w\tau \gg 1$ , tendremos:

$$\sqrt{\mathcal{E}(w)} = \sqrt{\mathcal{E}_{core}(w)} = \sqrt{\mathcal{E}_0(\tilde{n} + i\tilde{k})} \quad (2.44)$$

$$\tilde{k} = 0, \quad \tilde{n} = \sqrt{\frac{\mathcal{E}_{core}(w)}{\mathcal{E}_0}} \quad (2.45)$$

Esto quiere decir que a altas frecuencias, la contribución de los electrones libres es insignificante y que el comportamiento de los materiales es similar al de los dieléctricos [4].

### 2.4.3 Frecuencia de plasma

La frecuencia en la cual un material cambia de un “comportamiento metálico” a un “comportamiento aislante” es conocido como frecuencia de plasma  $\hat{w}_p$  y es definida como  $\mathcal{E}_1(\hat{w}_p) = 0$ . Así, para  $w \gg \hat{w}_p$  la onda se propaga en un medio tipo aislante y para  $w \ll \hat{w}_p$  se atenúan en un medio tipo conductor [4]. A partir de la teoría de Drude, se buscará la frecuencia de plasma. De la ecuación (2.35), obtenemos la parte real  $\mathcal{E}_1$  y la parte imaginario  $\mathcal{E}_2$  de la permitividad eléctrica.

$$\mathcal{E}_1 = \mathcal{E}_{core} - \frac{ne^2\tau^2}{m(1+w^2\tau^2)}, \quad \mathcal{E}_2 = \frac{1}{w} \frac{ne^2\tau}{m(1+w^2\tau^2)} \quad (2.46)$$

Evalutando  $\mathcal{E}_1(\hat{w}_p) = 0$ , se obtiene la frecuencia de plasma:

$$\hat{w}_p^2 = w_p^2 - \frac{1}{\tau^2} \quad \text{con} \quad w_p^2 = \frac{ne^2}{m\mathcal{E}_{core}} \quad (2.47)$$

Observaciones:

- Para hallar la frecuencia de plasma se acostumbra ignorar el término " $-\frac{1}{\tau^2}$ " pues es pequeño comparado con  $w_p^2$ . Esta frecuencia  $w_p$  es conocida como *Screened plasma frequency*.
- Si  $\mathcal{E}_{core} \rightarrow \infty$  entonces  $\hat{w}_p \rightarrow 0$ . Es decir, no hay una frecuencia de plasma.

De esta última observación, notamos que no siempre habrá una frecuencia de plasma. Para que exista una frecuencia de plasma, se debe cumplir la siguiente expresión matemática:

$$\exists w/\mathcal{E}_1(w) < 0 \quad (2.48)$$

Generalmente los valores de  $\mathcal{E}_1$  son positivos. Que exista una frecuencia  $w$  que arroja un  $\mathcal{E}_1$  negativo garantiza que en algún sector del espectro de  $\mathcal{E}_1$  existirá una transición de negativo a positivo. Dentro esta zona debe estar la frecuencia de plasma  $\mathcal{E}_1(w_{plasma}) = 0$ . Entonces, utilizando (2.46) y operando, se obtiene:

$$\mathcal{E}_{core} < \frac{ne^2\tau^2}{m(1+w^2\tau^2)} \quad (2.49)$$

Como  $1 + w^2\tau^2 \geq 1$ :

$$\mathcal{E}_{core} < \frac{ne^2\tau^2}{m(1+w^2\tau^2)} \leq \frac{ne^2\tau^2}{m} \quad (2.50)$$

$$\mathcal{E}_{core} < \frac{ne^2\tau^2}{m} \quad (2.51)$$

Esta propiedad la deben cumplir todos los materiales que tienen frecuencia de plasma y es conocida como "Propiedad de existencia de frecuencia de plasma".

Adicionalmente, analizamos el comportamiento de las funciones dieléctricas  $\mathcal{E}_1$  y  $\mathcal{E}_2$  en la vecindad de la frecuencia de plasma  $w_p$ . Es fácil notar que en esta vecindad el valor de  $\mathcal{E}_1$  es pequeño pues por definición  $\mathcal{E}_1(w_p) = 0$ , pero ¿ $\mathcal{E}_2$  también lo es? No siempre, depende del



valor de  $w_p$ . Únicamente cuando la frecuencia de plasma es grande se cumple que  $\mathcal{E}_2$  es pequeño. Para probar esta afirmación debemos demostrar que el valor de  $\mathcal{E}_2$  evaluado en  $w_p$  es pequeño. Si  $\mathcal{E}_2$  es pequeño en  $w_p$ , la tendencia a sus alrededores será la misma. Primero, reutilizamos la ecuación (2.46) evaluada en  $w_p$ :

$$\mathcal{E}_2(w_p) = \frac{1}{w_p} \frac{ne^2\tau}{m(1+w_p^2\tau^2)} \quad (2.52)$$

Luego, como estamos trabajando con una frecuencia de plasma grande, se cumple que  $w_p\tau \gg$

1. Esta aproximación nos permite eliminar el "1" del denominador ya que " $w_p^2\tau^2$ " es mucho más grande. Además, el valor exacto de la frecuencia de plasma es  $w_p^2 = \frac{ne^2}{m\epsilon_{core}}$ .

Reemplazando estos resultados en la ecuación anterior se obtiene:

$$\mathcal{E}_2(w_p) \cong \frac{\epsilon_{core}}{w_p\tau} \quad (2.53)$$

Como  $w_p\tau \gg 1$ , se cumple efectivamente que  $\mathcal{E}_2(w_p)$  también es pequeño.

## 2.5 Conductividad térmica en un metal

El modelo de Drude también permitió explicar la ley empírica de Wiedemann y Franz, propuesta en los años 1853. Esta ley establece que la relación entre la conductividad eléctrica y térmica es proporcional a la temperatura (ley válida para muchos metales), con una constante de proporcionalidad que es prácticamente la misma para todos los metales. Para demostrar la ley de Wiedemann y Franz, Drude asumió que la mayor parte de la "corriente térmica" en un metal es transportado por electrones libres. Esta suposición se basa en la observación empírica de que los metales conducen el calor mucho mejor que los aislantes. Es por eso que para Drude la conducción térmica de los iones es muchos menos importante que la conducción térmica de los electrones libres [1].

Para estimar la conductividad térmica se considera una barra de metal a través del cual la temperatura varía lentamente. También se asume que no hay sumideros de calor en los extremos entonces el extremo caliente tenderá a enfriarse y el extremo frío, a calentarse. Esto quiere decir que el flujo de calor será opuesto al flujo de temperatura. Además, se define la densidad de corriente térmica  $j^q$  como un vector paralelo a la dirección de calor y cuya magnitud es la energía por unidad de tiempo cruzando un área perpendicular al flujo. Para gradientes de temperatura pequeños, la ley de Fourier establece que la densidad de corriente térmica  $j^q$  es proporcional al gradiente de temperatura  $\nabla T$  [1].

$$j^q = -\kappa \nabla T \quad (2.54)$$

Donde la constante de proporcionalidad  $\kappa$  es conocida como conductividad térmica. Además, se asume que la corriente térmica  $j^q$  mantiene un flujo estable en la dirección longitudinal de la barra de metal (esta dirección será llamada la dirección  $x$ ). Además, el cuarto postulado del modelo de Drude establece que luego de una colisión, la velocidad con la que emerge un electrón depende de la temperatura local; Mientras más caliente sea el lugar de la colisión, el electrón emergerá con mayor velocidad. En consecuencia, a pesar de que la velocidad media en un punto es nula, los electrones que llegan desde el lado de mayor temperatura tendrán energías más altas que aquellos que llegan desde la zona de baja temperatura [1].

Teniendo todo esto en cuenta, como primera aproximación, se calcula la conductividad térmica en un modelo unidimensional. Tomemos un punto arbitrario  $x$ . Como estamos asumiendo que el flujo térmico es estable en toda la barra, la corriente térmica en “ $x$ ” será la misma que del sistema.

$$j^q = j^q(x) \quad (2.55)$$

Esto quiere decir que el valor de la densidad de corriente térmica es independiente del punto arbitrario  $x$  que se tome.

Si todos los electrones se moviesen en una sola dirección, la densidad corriente térmica sería la siguiente

$$j^q_{1 \text{ sola dirección}} = \mathcal{E} \cdot n \cdot v \quad (2.56)$$

Donde  $\mathcal{E}$  es la energía térmica por electrón,  $n$  es el número de portadores de carga por unidad de volumen y  $v$  es la velocidad de cada carga. Esta relación es fácil de verificar si partimos de la definición de cada uno de ellos.

$$n = \frac{\Delta \text{electrones}}{\Delta \text{volumen}}, \quad v = \frac{\Delta x}{\Delta t}, \quad \mathcal{E} = \frac{\Delta \text{Energía térmica}}{\Delta \text{electrones}}, \quad j^q = \frac{\Delta \text{Energía térmica}}{\Delta t \cdot \text{Area transversal}} \quad (2.57)$$

Sin embargo, la ecuación (2.56) no se puede aplicar directamente en el modelo unidimensional porque el movimiento de cargas está “polarizado”, es decir, la mitad se mueve hacia  $+x$  y la otra mitad hacia  $-x$ . Entonces podríamos decir que hay 2 “fuentes” de densidades térmicas que de notaremos por  $j^+$  (contribución de la zona caliente) y  $j^-$  (contribución de la zona fría).

$$j^q = j^+ + j^- \quad (2.58)$$

Por un lado, los electrones que provienen de la zona caliente, en promedio, experimentan su última colisión a  $x - v\tau$  (Postulado 3) entonces su energía térmica por electrón es de  $\mathcal{E}(T[x - v\tau])$ . Como solo participa la mitad de los electrones, el número de portadores por unidad de volumen es  $n/2$ . Entonces, utilizando la ecuación (2.56) obtenemos  $j^+$ .

$$j^+ = (n/2) \cdot (+v) \cdot \mathcal{E}(T[x - v\tau]) \quad (2.59)$$

Por otro lado, los electrones que provienen de la zona fría, en promedio, experimentan su última colisión a  $x + v\tau$ , entonces su energía térmica por electrón es de  $\mathcal{E}(T[x + v\tau])$ . Como solo participa la mitad de los electrones, el número de portadores por unidad de volumen es  $n/2$  y como los electrones se mueven en la dirección  $-x$  su velocidad es  $-v$ . Así, utilizando nuevamente la ecuación (2.56) obtenemos  $j^-$ .

$$j^- = (n/2) \cdot (-v) \cdot \mathcal{E}(T[x + v\tau]) \quad (2.60)$$

Con  $j^-$  y  $j^+$  obtenemos la corriente térmica total:

$$j^q = \frac{1}{2} \cdot n \cdot v \cdot [\mathcal{E}(T[x - v\tau]) - \mathcal{E}(T[x + v\tau])] \quad (2.61)$$

Como la variación del camino medio  $l = v\tau$  es muy pequeño, se puede expandir la energía  $\mathcal{E}$  alrededor de  $x$ .

$$\mathcal{E}(T[x - v\tau]) \approx \mathcal{E}(T[x]) - v\tau \frac{d(\mathcal{E}(T[x]))}{dx} = \mathcal{E}(T[x]) - v\tau \frac{d\mathcal{E}}{dT} \frac{dT}{dx} \quad (2.62)$$

$$\mathcal{E}(T[x + v\tau]) \approx \mathcal{E}(T[x]) + v\tau \frac{d(\mathcal{E}(T[x]))}{dx} = \mathcal{E}(T[x]) + v\tau \frac{d\mathcal{E}}{dT} \frac{dT}{dx} \quad (2.63)$$

Reemplazando las aproximaciones anteriores en (2.61) se obtiene la densidad de corriente térmica en un modelo unidimensional.

$$j^q = -n \cdot v^2 \cdot \tau \cdot \frac{d\mathcal{E}}{dT} \frac{dT}{dx} \quad (2.64)$$

Este resultado también es válido para el caso tridimensional, aunque necesita algunos cambios.

Primero, se debe reemplazar  $\frac{dT}{dx}$  por un gradiente de temperatura  $\nabla T$ . Luego, se tiene reemplazar  $v$  por la componente en  $x$  de la velocidad cuadrática media  $v^2$ . Entonces, la densidad de corriente térmica para el caso tridimensional es:

$$j^q = -n \cdot \langle v_x \rangle^2 \cdot \tau \cdot \frac{d\mathcal{E}}{dT} \nabla T \quad (2.65)$$

Como en el equilibrio térmico la distribución de velocidad es isotrópica, se cumple que

$$\langle v_x \rangle^2 = \langle v_y \rangle^2 = \langle v_z \rangle^2 = \frac{v^2}{3}. \text{ Además, la capacidad calorífica es igual a } C_v = n \frac{d\mathcal{E}}{dT}.$$

Reemplazando estos resultados en la ecuación anterior, queda lo siguiente:

$$j^q = \frac{1}{3} v^2 \tau \cdot C_v \cdot (-\nabla T) \quad (2.66)$$

Comparando este resultado con la ley de Fourier (ecuación 2.54) se obtiene la conductividad térmica  $\kappa$ .

$$\kappa = \frac{1}{3} v^2 \tau \cdot C_v \quad (2.67)$$

Con este resultado se halla el número de Lorenz. El número de Lorenz está definida como la proporción entre  $\frac{\kappa}{\sigma}$  y la temperatura. Para calcular, tomamos la conductividad térmica de la ecuación (2.67) y lo dividimos con la conductividad eléctrica de la ecuación (2.16).

$$\frac{\kappa}{\sigma} = \frac{\frac{1}{3} v^2 \cdot C_v \cdot m}{e^2 \cdot n} \quad (2.68)$$

Drude aplicó la ley clásica de gases ideales para el cálculo del calor específico  $C_v$  y la velocidad cuadrática media  $v^2$ . Esta suposición fue “natural” ya que las suposiciones básicas del modelo de Drude se basan en la teoría cinética de gases [1].

$$C_v = \frac{3}{2} n k_B, \quad \frac{1}{2} m v^2 = \frac{3}{2} T k_B \quad (2.69)$$

Reemplazando estos valores en la ecuación (2.68), obtenemos el número de Lorenz

$$L = \frac{\kappa}{\sigma T} = \frac{3}{2} \left( \frac{k_B}{e} \right)^2 \quad \text{con } L: \text{Número de Lorenz} \quad (2.70)$$

El valor numérico del número de Lorenz es  $1.11 \times 10^{-8} \text{ watt} - \text{ohm}/K^2$ . Este número, a pesar de ser la mitad del valor original, coincidió muy bien con los resultados experimentales. Este éxito, aunque totalmente fortuito, fue tan impresionante que motivó a nuevas investigaciones del modelo. Sin embargo, fue bastante desconcertante que la contribución electrónica al calor específico fuera remotamente comparable a  $\frac{3}{2} n k_B$ . De hecho, en aquellos tiempos, a temperatura de ambiente, no parecía haber ninguna contribución de los electrones al calor específico. El impresionante éxito del modelo de Drude, fuera de su error de factor dos, fue consecuencia de 2 errores. A temperatura de ambiente, la contribución electrónica real al

calor específico es aproximadamente 100 veces menos que la predicción clásica, pero la velocidad cuadrática media es 100 veces más grande. Así, el resultado exacto no difiere del resultado fortuito de Drude [1].

En el resultado anterior se asumió que los electrones llegan al punto “x” con la misma velocidad  $v$ , pero intuitivamente pensaríamos que de la zona de mayor calor deben provenir electrones más enérgicos (con más velocidad) y de la zona más fría, los menos enérgicos (con menor velocidad). Esta idea es válida cuando el sistema no es estable, pero luego puede ser ignorada. Al inicio se va a cumplir efectivamente que va a haber un flujo neto de electrones moviéndose hacia la derecha (dirección  $+x$ ). Las cargas se acumularán en la zona más fría hasta que se genere un campo eléctrico opuesto a esta acumulación de cargas (no hay un flujo continuo de electrones por que el circuito es abierto). Cuando el sistema alcance el estado estable, la velocidad será la misma en todas las direcciones [1].

En ese sentido, vamos a considerar un último efecto físico para esta sección: Un gradiente de temperatura a lo largo de una barra delgada que está acompañada por un campo eléctrico opuesto al gradiente de temperatura, es decir, la primera instancia de la observación anterior. El campo eléctrico que se opone al gradiente de temperatura es conocido como termocampo y convencionalmente se define así:

$$E = Q \nabla T \quad (2.71)$$

Donde  $Q$  es conocido como termopotencia. Para estimar  $Q$  primero asumiremos un modelo unidimensional y luego se generalizará. Tomamos un punto arbitrario  $x$ . A la zona más caliente llegan electrones con velocidad  $v[x - v\tau]$  y a la zona más fría, con velocidad  $v[x + v\tau]$ , entonces la velocidad media es:

$$v_Q = \frac{1}{2} (v[x - v\tau] - v[x + v\tau]) \quad (2.72)$$

Como la variación del camino medio  $l = v\tau$  es muy pequeño, se puede expandir alrededor de  $x$  y encontrar:

$$v[x - v\tau] \approx v[x] - v\tau \frac{dv}{dx} \quad (2.73)$$

$$v[x + v\tau] \approx v[x] + v\tau \frac{dv}{dx} \quad (2.74)$$

Reemplazando en (2.72) se obtiene:

$$v_Q = -\tau \frac{d\left(\frac{v^2}{2}\right)}{dT} \frac{dT}{dx} \quad (2.75)$$

Nuevamente, como en el caso anterior, se generaliza a 3 dimensiones con algunos cambios.

Primero, se debe reemplazar  $\frac{dT}{dx}$  por un gradiente de temperatura  $\nabla T$ . Luego, se tiene reemplazar  $v$  por la componente en  $x$  de la velocidad cuadrática media  $v^2$ . Además, como en el estado estable la velocidad es isotrópica se cumple que  $\langle v_x \rangle^2 = \langle v_y \rangle^2 = \langle v_z \rangle^2 = \frac{v^2}{3}$ . Reemplazando, se obtiene lo siguiente:

$$v_Q = -\frac{\tau}{6} \frac{dv^2}{dT} \nabla T \quad (2.76)$$

El anterior resultado expresa la velocidad que tienen los electrones según el postulado 4 de Drude, pero tomando en cuenta la física Newtoniana llegaremos a que la velocidad media, generada por el termocampo, es de la forma (ver ecuación 2.15):

$$v_E = \frac{-e \cdot E \cdot \tau}{m} \quad (2.77)$$

En el estado estable ambas velocidades se anulan, así que  $v_Q + v_E = 0$ . Resolviendo:

$$E = -\left(\frac{1}{3e}\right) \frac{d(mv^2/2)}{dT} \nabla T \quad (2.78)$$

Comparando (2.78) con (2.71) se obtiene el valor de la termopotencia  $Q$ :

$$Q = -\left(\frac{1}{3e}\right) \frac{d(mv^2/2)}{dT} \quad (2.79)$$

Este resultado aún depende de la velocidad cuadrática media. Así que para tener cuentas más precisas usaremos, erróneamente, las relaciones de gases ideales en electrones (ecuación 2.69), como originalmente lo propuso Drude. Así, la termopotencia  $Q$  tomará el valor de:

$$Q = -\frac{k_B}{2e} \quad (2.80)$$

Este valor es 100 veces menor que el valor experimental pues la velocidad cuadrática media es en realidad 100 veces mayor. Así culminamos esta sección mostrando claros ejemplos donde el modelo de Drude requiere un análisis más exhaustivo (estadística cuántica) para remover todas las discrepancias (especialmente las relacionadas al factor 100) [1].

## 2.6 Modelo de Drude-Lorentz

El modelo de Drude-Lorentz es un modelo clásico que se utiliza para comprender la interacción entre los átomos de un medio con la luz. El modelo de Drude-Lorentz también proporciona información sobre la reflexión y transmisión de la luz. En este modelo clásico se asume que el electrón oscila como si estuviese en un medio viscoso. También se asume que los electrones están atados a sus núcleos atómicos a través de “resortes” (los resortes representan el enlace entre los dipolos) y estos núcleos están fijos (pues la masa del núcleo atómico es mucho mayor que la de los electrones) [6].

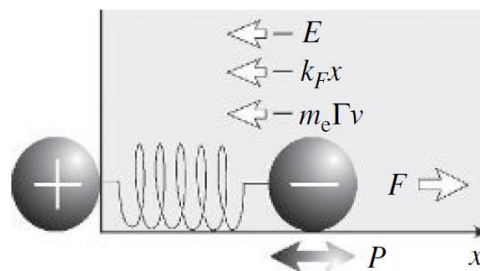


Figura 2. Modelo físico del modelo de Drude-Lorentz [6].



Si sobre cada electrón actúa un campo eléctrico sinusoidal de la forma  $E = E_0 \exp(i\omega t)$  y se usa la segunda Ley de Newton, se obtiene:

$$\sum \text{Fuerzas} = \text{masa} \cdot \text{aceleración} \quad (2.81)$$

$$\text{fuerza eléctrica} + \text{fuerza de resorte} + \text{viscosidad} = \text{masa} \cdot \text{aceleración} \quad (2.82)$$

$$-e E_0 \exp(i\omega t) - m_e \omega_0^2 x - m_e \Gamma \frac{dx}{dt} = m_e \frac{d^2x}{dt^2} \quad (2.83)$$

Para resolver esta ecuación diferencial, se asume que la solución es también una sinusoidal de la forma  $x(t) = a \exp(i\omega t)$ , donde “a” es un parámetro desconocido. Sustituyendo en (2.83) se obtiene que “a” toma el valor de:

$$a = -\frac{e E_0}{m_e} \frac{1}{(\omega_0^2 - \omega^2) + i\Gamma\omega} \quad (2.84)$$

A partir de este resultado, se quiere obtener el valor de la constante dieléctrica. Se parte de la siguiente relación:

$$\mathcal{E} = 1 + \frac{P}{\epsilon_0 E_0} \quad (2.85)$$

Donde lo único que falta calcular es el valor de la polarización. Por definición, la polarización de un dipolo es el producto de la carga del dipolo con la separación de los dipolos. Si  $N_e$  es el número de electrones por unidad de volumen, entonces la carga promedio del dipolo es  $-e N_e$ .

Como la separación del dipolo es  $x(t)$ , la polarización total resulta:

$$P = -e N_e x(t) \quad (2.86)$$

Reemplazando este resultado en la ecuación (2.153) conseguimos los coeficientes dieléctricos  $\mathcal{E}_1$  y  $\mathcal{E}_2$ .

$$\mathcal{E}_1 = 1 + \frac{e^2 N_e}{\epsilon_0 m_e} \frac{(\omega_0^2 - \omega^2)}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \Gamma^2 \omega^2}; \quad \mathcal{E}_2 = \frac{e^2 N_e}{\epsilon_0 m_e} \frac{\Gamma \omega}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \Gamma^2 \omega^2} \quad (2.87)$$

Asumiremos que  $w_0 = 6.08 \times 10^{15}$ ,  $\Gamma = 1.2 \times 10^{15}$  y  $A = 1.59 \times 10^{32}$  ( $A = \frac{e^2 N_e}{\epsilon_0 m_e}$ ). Las gráficas obtenidas a través de programa Wolfram Mathematica son las siguientes:

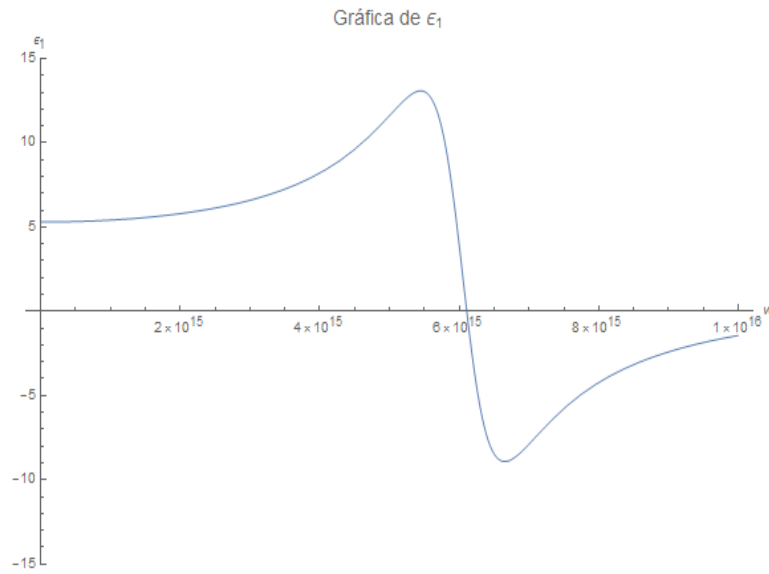


Figura 3. Gráfica de  $w$  vs  $\epsilon_1$  cuando  $w_0 = 6.08 \times 10^{15}$ ,  $\Gamma = 1.2 \times 10^{15}$  y  $A = 1.59 \times 10^{32}$  ( $A = \frac{e^2 N_e}{\epsilon_0 m_e}$ ).

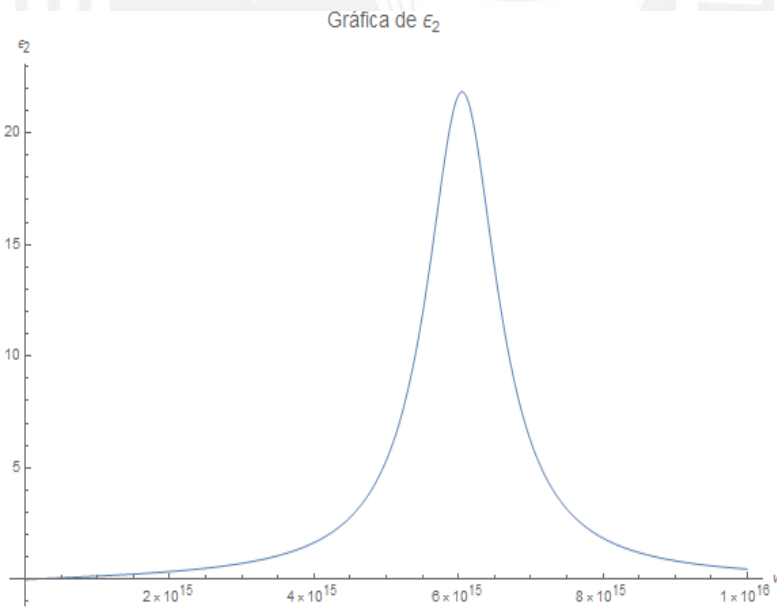


Figura 4. Gráfica de  $w$  vs  $\epsilon_2$  cuando  $w_0 = 6.08 \times 10^{15}$ ,  $\Gamma = 1.2 \times 10^{15}$  y  $A = 1.59 \times 10^{32}$  ( $A = \frac{e^2 N_e}{\epsilon_0 m_e}$ ).

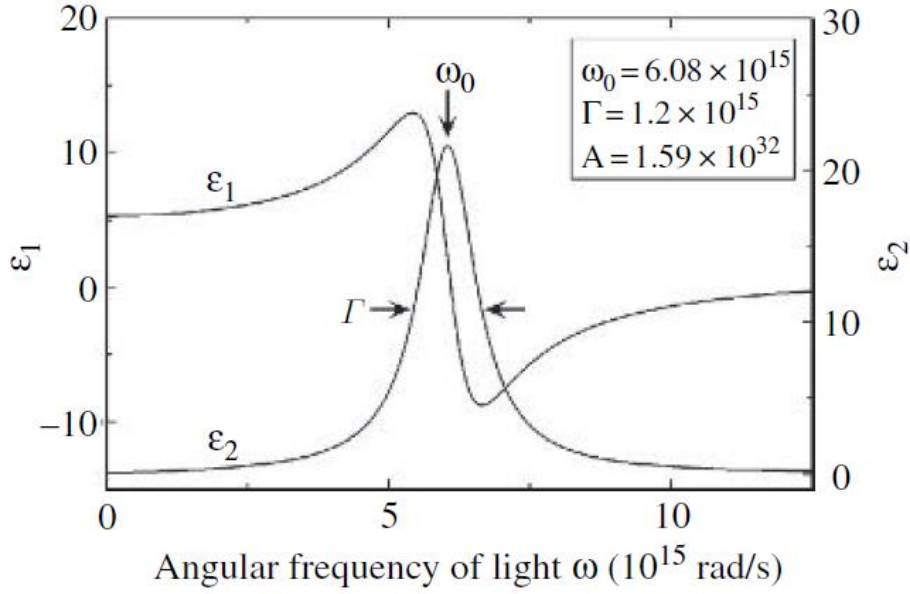


Figura 5. Gráficas de  $\epsilon_1$  y  $\epsilon_2$  cuando  $\omega_0 = 6.08 \times 10^{15}$ ,  $\Gamma = 1.2 \times 10^{15}$  y  $A = 1.59 \times 10^{32}$  ( $A = \frac{e^2 N_e}{\epsilon_0 m_e}$ ) obtenidas de la literatura [6].

En el análisis de data real, generalmente se expresa el modelo de Lorentz usando la energía de Fotón. Transformando (2.85) se obtiene:

$$\epsilon = 1 + \frac{A}{(En_0^2 - En^2) + i\Gamma En} \quad \text{con } A = \frac{e^2 N_e \hbar}{\epsilon_0 m_e} \quad \text{y } En = \hbar \omega \quad (2.88)$$

Además, se suele describir la función dieléctrica como la suma de diferentes osciladores, a los cuales denotaremos con el índice  $j$ .

$$\epsilon = 1 + \sum_j \frac{A_j}{(En_{0j}^2 - En^2) + i\Gamma_j En} \quad (2.89)$$

Por otro lado, una expresión mecánico-cuántica es descrita con la siguiente ecuación.

$$\epsilon = 1 + \sum_j \frac{A_j En_{0j}}{(En_{0j}^2 - En^2) + i\Gamma_j En} \quad (2.90)$$

Aunque esta sea una expresión más precisa, la ecuación que proviene de la descripción clásica aún es válida. Lo único que va a cambiar entre las ecuaciones (2.89) y (2.90) es el valor del coeficiente  $A$ , coeficiente que es conocido como *oscillator strength*.

### 2.6.1 Interpretación del Modelo de Lorentz

Ahora se analiza la transmisión de la luz en un medio con mayor detalle usando los resultados derivados del modelo de Lorentz.

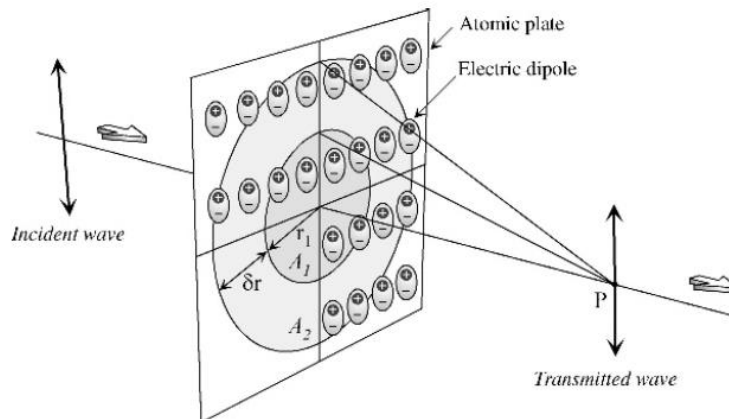


Figura 6. Transmisión de la luz en una placa atómica bidimensional hipotética.

Para comprender la propagación de la luz dentro de un medio, primero analizamos la transmisión de la luz en un medio más sencillo: una placa atómica. Aquí, la placa atómica es una placa bidimensional hipotética que consta de muchos dipolos ordenados. Cuando la luz entra en la placa, los dipolos comienzan a oscilar y generan radiación. Entonces, el campo eléctrico formado por la placa bidimensional en el punto  $P$  es descrito por la suma de las ondas radiadas por cada uno de los dipolos de la placa [6].

Nuestro primer objetivo es calcular el campo radiado por la placa bidimensional en el punto  $P$ . Esta labor la realizaremos “por partes”. Se descompone la placa en infinitas regiones. La primera es una región circular de radio  $r_1$  y de área  $A_1$ . Las demás regiones son coronas circulares, de área  $A_n$  ( $n > 1$ ), que están rodeadas por círculos de radio  $r_{n-1}$  y  $r_{n-1} + \delta r$ . Cada una de estas regiones genera su propio campo eléctrico en  $P$  que denotaremos por  $E(A_n)$ . En notación fasorial, este campo eléctrico se reescribe así:

$$E(A_n) = |E(A_n)| \exp\{i[\omega t + \delta(A_n)]\} \quad (2.91)$$

Si calculamos el campo eléctrico solo a  $t = 0$ , la anterior ecuación se reduce.

$$E(A_n) = |E(A_n)| \exp[i \delta(A_n)] \quad (2.92)$$

Ajustando convenientemente que la fase para  $A_1$  sea 0, se tendría que  $E(A_1)$  es paralelo a  $Re(E)$ .

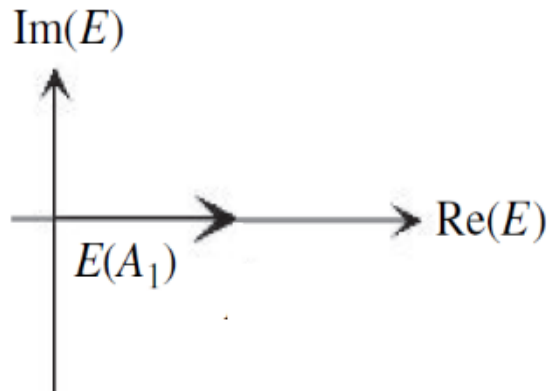


Figura 7. Gráfica fasorial de  $E(A_1)$  en el plano complejo [6].

Ahora, para las siguientes regiones asumimos lo siguiente:

- Entre los campos  $E(A_n)$  y  $E(A_{n-1})$  hay un desfase constante  $\delta$ . Por ejemplo, la luz emitida por la región  $A_2$  tiene que recorrer un camino mayor que  $A_1$ . De aquí se deduce que entre ambos campos hay un desfase. Este resultado se puede generalizar para cualquier par de áreas consecutivas. Ahora, este desfase en principio puede ser aleatorio, pero se toma como constante porque entre cada corona circular hay una desfase constante  $\delta r$ .
- La amplitud de  $E(A_n)$  va decreciendo conforme aumenta "n". Para entender esto, recordemos la radiación emitida por un dipolo.

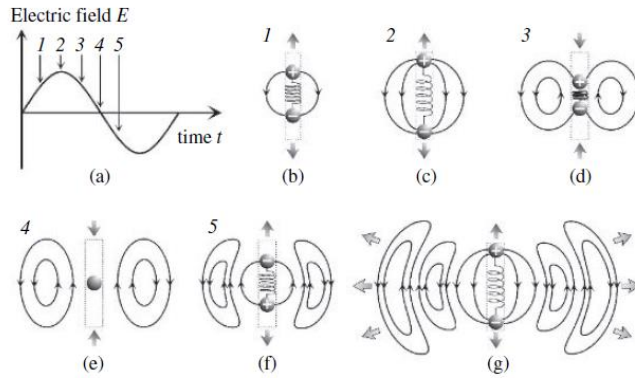


Figura 8. Radiación generada por un dipolo y gráfica del campo eléctrico a través del tiempo.

Del gráfico notamos que no hay radiación en la dirección de oscilación de los dipolos.

Es por eso que para las regiones más alejadas de P, la amplitud es menor [6].

Cuando graficamos el campo producido por cada una de las placas, notamos que se forma un patrón “circular”. Esto se debe al cambio de fase entre cada par consecutivo de áreas. Además, estos círculos comienzan a reducirse hasta converger a un punto. Esto se debe a que la amplitud del campo se reduce de área en área. Entonces, las gráficas que obtenemos son las siguientes:

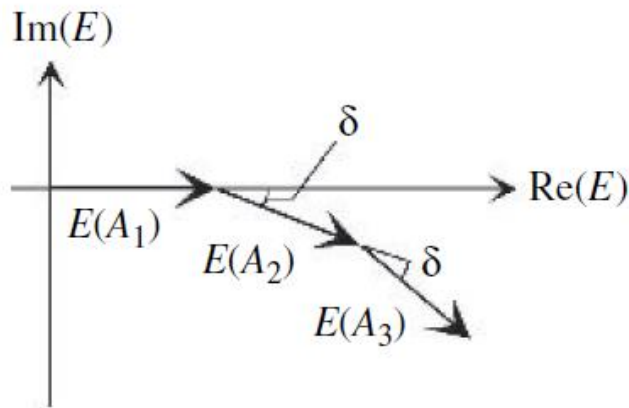


Figura 9. Gráfica fasorial de los campos producidos por las 3 primeras áreas de la placa atómica bidimensional.

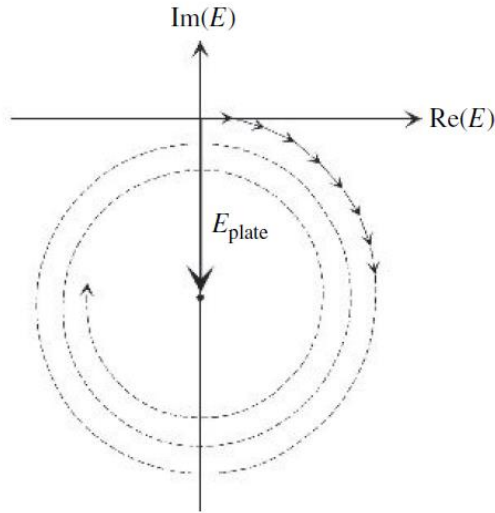


Figura 10. Gráfica fasorial de los campos producidos por todas las áreas de la placa atómica bidimensional.

De la figura 10, se evidencia la suma de todos los campos eléctricos converge a un único punto indicado por el fasor  $E_{plate}$ . Por suma de fasores, este campo  $E_{plate}$  representa el campo eléctrico total de la placa bidimensional. Es evidente que la fase de  $E_{plate}$  es  $\delta_{plate} = -90^\circ$ . Esto quiere decir que el campo eléctrico de la placa tiene un cambio de fase de  $-90^\circ$  comparada con la fase del área  $A_1$ . Matemáticamente, este resultado lo representamos así:

$$\delta_{plate} = \delta_{dip} - 90^\circ \quad (2.93)$$

Observación:

- De ahora en adelante, cuando hablemos del “dipolo eléctrico” en realidad estaremos hablando del campo eléctrico producido por el área  $A_1$  ya que se puede tomar  $A_1$  tan pequeño como queramos de tal manera que cubra solo el tamaño de un dipolo eléctrico.

Con este resultado, ya estamos en posición de aplicar el modelo de Lorentz con mucho más detalle. Primero aplicamos el modelo de Lorentz sobre la oscilación de un dipolo eléctrico. De la ecuación (2.84), la amplitud de movimiento es de la forma:

$$a = -\frac{e E_0}{m_e} \frac{1}{(w_0^2 - w^2) + i\Gamma w} \quad (2.94)$$

Observación:

- La frecuencia  $w$  es la frecuencia del campo eléctrico al que se expone el dipolo mientras que  $w_0$  es la frecuencia natural o de resonancia del dipolo eléctrico.

Esta amplitud es un número imaginario. Es mejor expresarlo en forma fasorial. La amplitud de oscilación del dipolo tiene los siguientes parámetros:

$$a = |a_{dip}| \exp(i\delta_{dip}) \quad (2.95)$$

$$\delta_{dip} = \tan^{-1} \left( -\frac{\Gamma\omega}{\omega_0^2 - \omega^2} \right) ; \quad |a_{dip}| = \left( \frac{E_0 e}{m_e} \right) \frac{1}{\sqrt{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \Gamma^2 \omega^2}}$$

Lo que se realiza a continuación es interpretar y graficar  $\delta_{dip}$  y  $|a_{dip}|$ . Asumimos nuevamente que  $w_0 = 6.08 \times 10^{15}$  y  $\Gamma = 1.2 \times 10^{15}$ . Por un lado, el gráfico de  $\delta_{dip}$  es el siguiente:

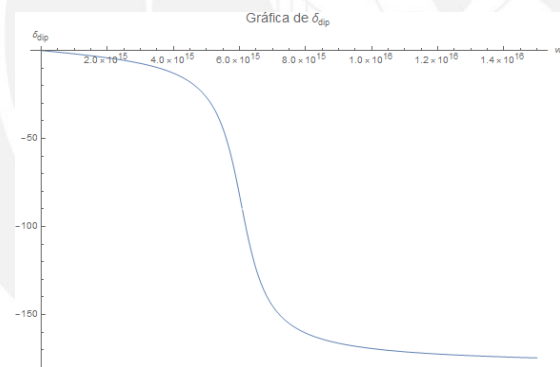


Figura 11. Gráfica  $w$  vs  $\delta_{dip}$  elaborada en Wolfram Mathematica.

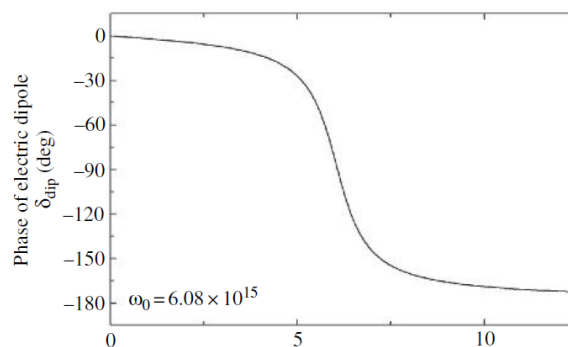


Figura 12. Gráfica  $w$  vs  $\delta_{dip}$  obtenida de la literatura [6].



De los gráficos anteriores interpretamos que la fase del dipolo  $\delta_{dip}$  crece conforme aumenta la oscilación del campo eléctrico. También, notamos que a altas frecuencias el desfase converge a -180. Eso significa que el dipolo se mueve en dirección contraria al campo eléctrico. Es decir, si el campo eléctrico apunta “hacia abajo”, el dipolo estará oscilando “hacia arriba” y viceversa. En otras palabras, el dipolo no puede seguir la oscilación de la luz [6].

Además, sabemos que  $\delta_{plate} = \delta_{dip} - 90$  (ecuación 2.93), entonces podemos graficar conjuntamente  $\delta_{plate}$  y  $\delta_{dip}$ , quedando lo siguiente:

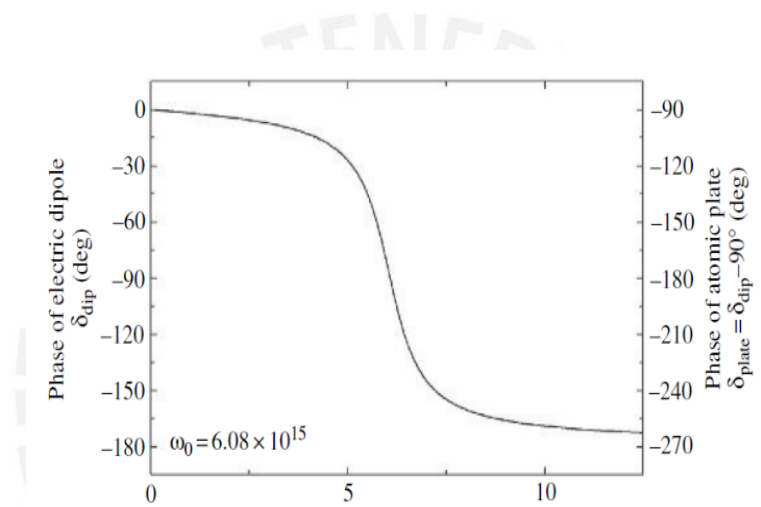


Figura 13. Gráfica de  $\delta_{dip}$  y  $\delta_{plate}$  obtenida de la literatura [6].

Por otro lado, la gráfica de la amplitud normalizada  $|a_{dip}|$  es la siguiente:

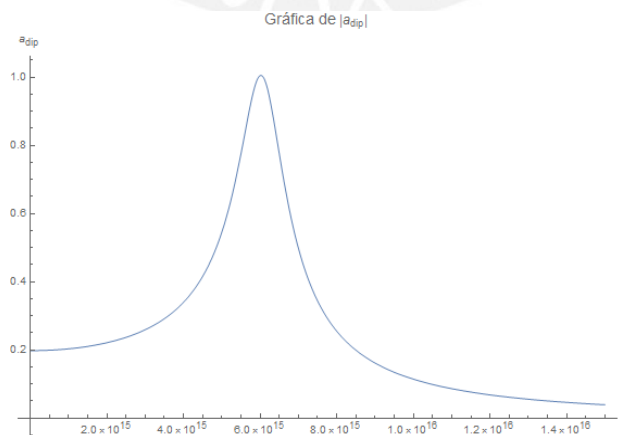


Figura 14 Gráfica de  $w$  vs  $|a_{dip}|$  elaborada en Wolfram Mathematica.

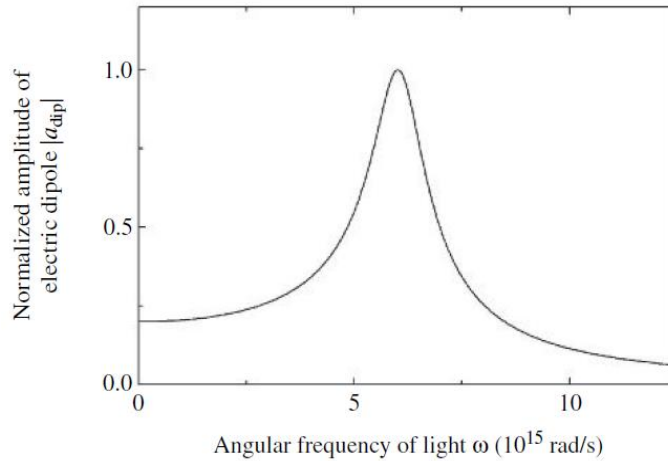


Figura 15. Gráfica de  $w$  vs  $|a_{dip}|$  obtenida de la literatura [6].

Del gráfico interpretamos que la amplitud es máxima para  $w = w_0$ . También, notamos que la amplitud  $|a_{dip}|$  a frecuencias muy altas  $w \gg w_0$  es menor que a frecuencias muy bajas  $w \ll w_0$ . Esto se debe a que a altas frecuencias el dipolo no puede seguir la fuerza del campo eléctrico mientras que a bajas frecuencias prácticamente no hay campo eléctrico pero domina su frecuencia natural [6].

Lo que se quiere probar ahora es que  $\mathcal{E}_1$  y  $\mathcal{E}_2$  representan la fase y la amplitud de la luz transmitida, respectivamente. Antes de empezar propiamente con el análisis, debemos entender que la luz transmitida es resultado de la interacción de la luz incidente con el campo generado por toda la placa. Es decir:

$$E_t = E_i + E_{plate} \quad (2.96)$$

Expresando cada término en forma fasorial nos queda lo siguiente:

$$E_t = |E_i| \exp[i(\omega t + \delta_i)] + |E_{plate}| \exp[i(\omega t + \delta_{plate})] \quad (2.97)$$

Si asumimos que  $\delta_i = 0$  y que  $|E_{plate}|$  es proporcional a  $|a_{dip}|$  con  $k$  como constante de proporcionalidad, obtenemos:

$$E_t = |E_i| \exp[i(\omega t)] + \kappa |a_{\text{dip}}| \exp[i(\omega t + \delta_{\text{plate}})] \quad (2.98)$$

Con esta ecuación analizamos primero la fase de luz transmitida y luego de su amplitud.

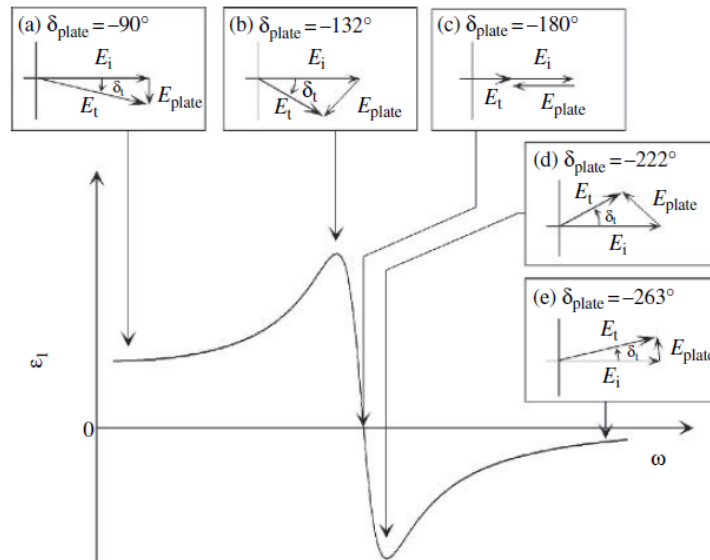


Figura 16. Espectro  $\mathcal{E}_1$  del modelo de Lorentz y los 5 puntos a interpretar [6].

La gráfica anterior, solo da información sobre 5 puntos del espectro de  $\mathcal{E}_1$ . Se resume el comportamiento de la fase  $\delta_t$  a través de la siguiente tabla:

Tabla 1

*Comportamiento de  $\delta_t$  vs  $\mathcal{E}_1$  en 5 puntos*

Puntos	$\delta_t$	$\mathcal{E}_1$
a	pequeño(-)	pequeño(+)
b	mínimo	máximo
c	0	0
d	máximo	mínimo
e	pequeño(+)	pequeño(-)

De la tabla, deducimos que la fase  $\delta_t$  se comporta de manera “opuesta” a  $\mathcal{E}_1$ . Si bien este primer análisis nos da la intuición del vínculo entre la fase  $\delta_t$  y  $\mathcal{E}_1$ , es necesario un análisis más exhaustivo. Por eso, graficamos todo el espectro de la fase  $\delta_t$ . No nos limitamos a 5 puntos.

Tomamos la ecuación (2.98). Esta ecuación tiene una constante  $k$  al que fijamos el valor de  $2.277 \times 10^{19}$ . Expandimos (2.98) con la ecuación de Euler y obtenemos:

$$E_t = [E_i + k |a_{dip}| \cos(\delta_{plate})] + i[k |a_{dip}| \sen(\delta_{plate})] \quad (2.99)$$

En principio, nos falta el valor del módulo del campo eléctrico incidente, pero no es necesario pues conseguimos “anular” este valor a través de manipulación algebraica. Reemplazamos el valor de  $|a_{dip}|$ , tomamos  $E_i = E_0$  y factorizamos  $E_i$ . El resultado es el siguiente:

$$E_t = E_i \left\{ \left[ 1 + \frac{k e}{m_e} \frac{1}{\sqrt{(w_0^2 - w^2) + (\Gamma w)^2}} \cos(\delta_{plate}) \right] + i \left[ \frac{k e}{m_e} \frac{1}{\sqrt{(w_0^2 - w^2) + (\Gamma w)^2}} \sen(\delta_{plate}) \right] \right\} \quad (2.100)$$

Por practicidad, consideramos  $E_i$  como un factor de normalización y solo trabajamos con los términos que están dentro de las llaves. El valor de la fase de la placa  $\delta_{plate}$  puede ser calculada a través de la fase del dipolo  $\delta_{dip}$ . Debemos recordar que  $\delta_{plate}$  y  $\delta_{dip}$  se diferencian en  $90^\circ$  y que este último está explícitamente descrito en la ecuación (2.95). Entonces conseguimos graficar lo siguiente:

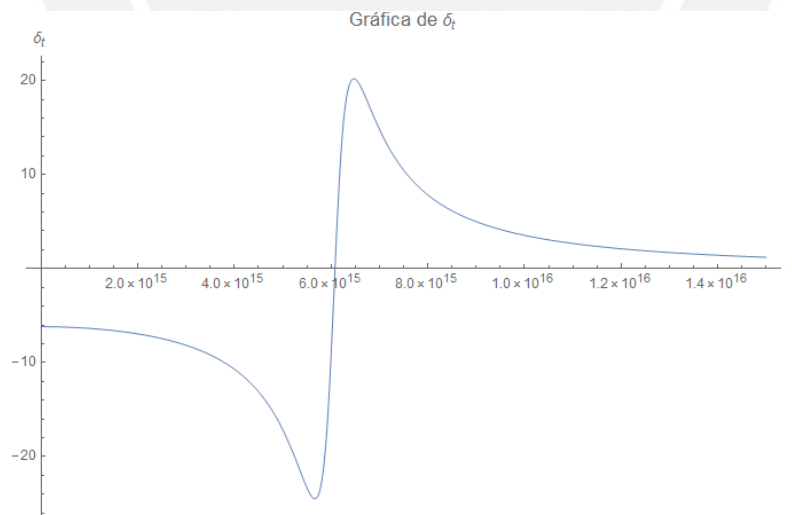


Figura 17. Espectro  $\delta_t$  según el modelo de Lorentz para un placa bidimensional elaborado en Wolfram

Mathematica

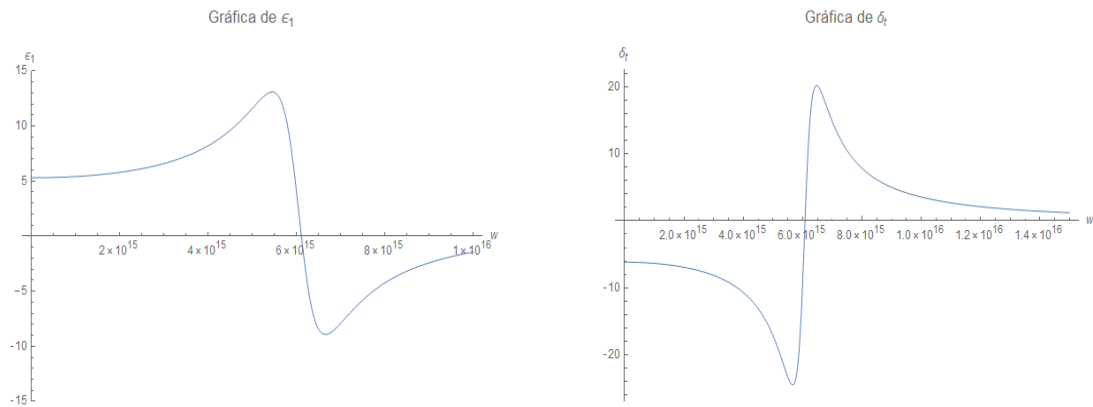


Figura 18. Espectro  $\mathcal{E}_1$  y  $\delta_t$  según el modelo de Lorentz para un placa bidimensional hipotética elaborado en Wolfram Mathematica

Con este último gráfico, se puede apreciar en todo el espectro que  $\mathcal{E}_1$  y  $\delta_t$  son “simétricos respecto al eje “x” y no es solo la intuición de 5 puntos.

Ahora, graficaremos la amplitud de la luz transmitida y la vincularemos con  $\mathcal{E}_2$ . Para graficar la amplitud, podemos reutilizar la ecuación (2.100) y el resultado es la siguiente:

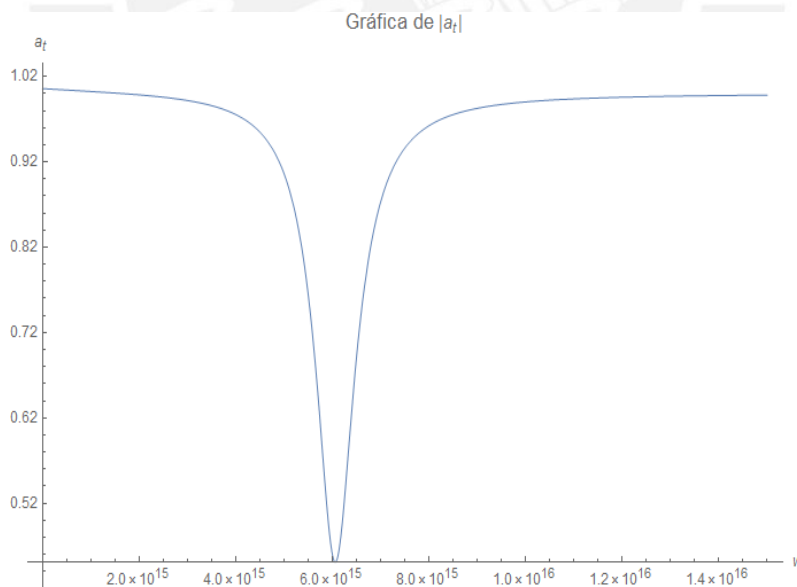


Figura 19. Espectro de  $|E_t|$  según el modelo de Lorentz para un placa bidimensional hipotética elaborado en Wolfram Mathematica

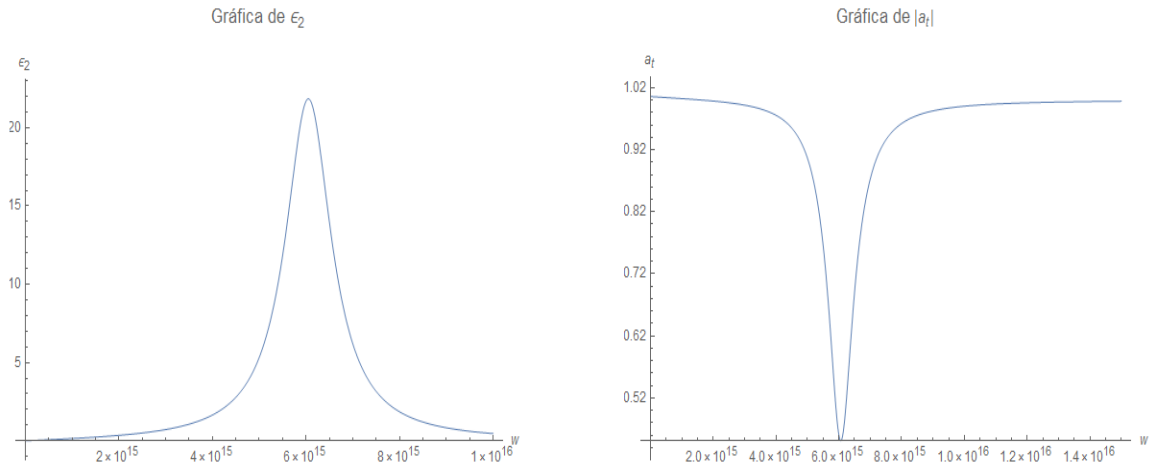


Figura 20. Espectro  $\mathcal{E}_2$  y  $|E_t|$  según el modelo de Lorentz para un placa bidimensional hipotética elaborado en Wolfram Mathematica

De este gráfico, interpretamos que  $\mathcal{E}_2$  y  $|E_t|$  también son “opuestas”, en el sentido de que cuando  $\mathcal{E}_2$  es mínimo,  $|E_t|$  es máximo y viceversa. Así se confirma que  $\mathcal{E}_1$  y  $\mathcal{E}_2$  representan la fase y la amplitud de la luz transmitida, respectivamente.

Observación:

- Las Figuras 17 y 19 coinciden con las gráficas que se encuentra en la Literatura.

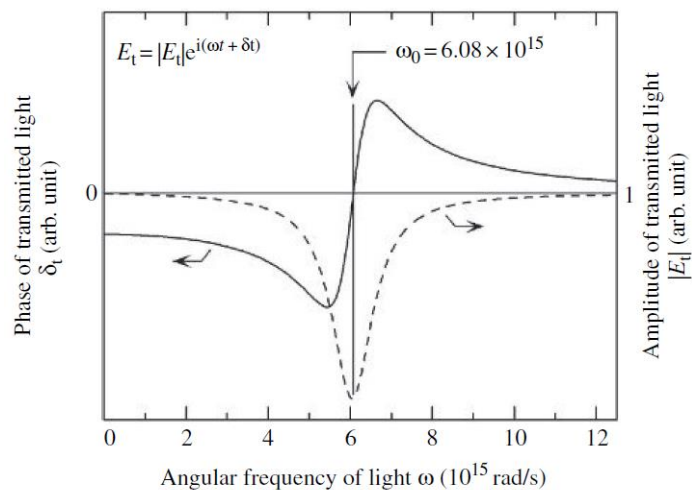


Figura 21. Espectro  $\delta_t$  y  $|E_t|$  obtenido de la literatura [6].

Los anteriores resultados pueden ser utilizados para interpretar la propagación de la luz en un medio tridimensional. Nos enfocamos solo en medios transparentes ( $w \ll w_0$  o  $w \gg w_0$ ) y asumimos que este medio está formado por infinitas capas bidimensionales.

Por un lado, para frecuencias muy bajas  $w \ll w_0$ , la fase de la placa  $\delta_{plate}$  es  $-90^\circ$ . Pero este resultado es válido para una sola placa bidimensional. Aquí debemos analizar infinitas placas. Entonces, para la siguiente placa, el desfase será  $-90^\circ$  más un desfase adicional ya que la luz tendrá que hacer un recorrido adicional para llegar a esta segunda placa. Y seguimos así hasta recorrer todas las placas. Asimismo, la amplitud se irá reduciendo de capa en capa [6]. Entonces, comenzará a formarse el siguiente patrón:

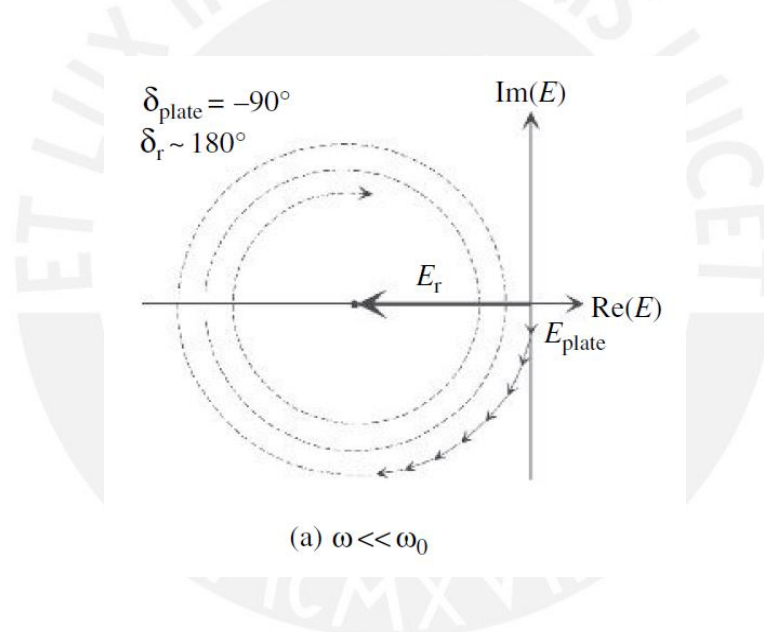
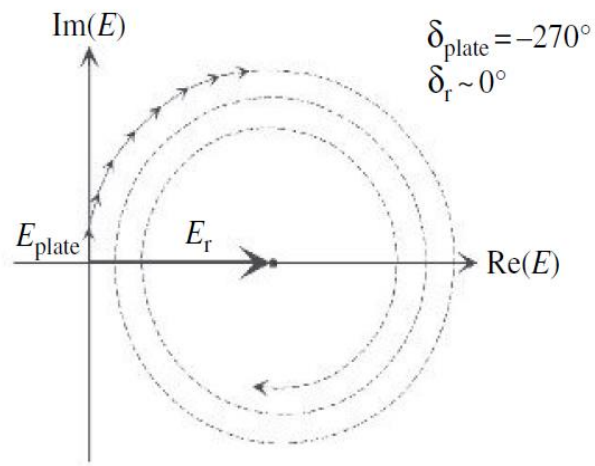


Figura 22. Representación de la luz reflejada para un medio cuando  $w \ll w_0$  [6].

Para hallar la luz transmitida sumaremos las contribuciones de los campos producidos por cada una de las placas. Así, concluimos que para  $w \ll w_0$  la fase de la luz transmitida es aproximadamente  $180^\circ$ .

Por otro lado, para frecuencias muy altas  $w \gg w_0$  la fase de una sola placa  $\delta_{plate}$  es  $-270^\circ$ . Siguiendo el mismo análisis y graficando el campo eléctrico de todas las placas, inferimos que la fase de la luz transmitida es prácticamente  $0^\circ$ .



(b)  $\omega \gg \omega_0$

Figura 23. Representación de la luz reflejada para un medio cuando  $w \gg w_0$  [6].

De estos resultados, concluimos que la luz transmitida en medios transparentes solo cambia de fase  $0^\circ$  o  $180^\circ$  [6].



### 3.-TRANSICIÓN DE MOTT

#### 3.1 Clasificación de Metales y Aislantes

Para decidir si un material es un metal o un aislante, primero se le debe someter a las siguientes condiciones:

1. Se le debe aplicar un campo externo “débil” tal que la ley de Ohm entre la densidad de corriente  $j_\alpha$  y el propio campo  $E_\beta$  cumplen la siguiente relación:

$$j_\alpha(\mathbf{q}, \omega) = \sum_{\beta} \sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \omega) E_\beta(\mathbf{q}, \omega)$$

Con  $\alpha, \beta = 1, \dots, d$ ; donde  $d$  es la dimensión del sistema

2. La temperatura del sistema debe ser  $T = 0$ .

Bajo estas condiciones, un material será aislante si la conductividad eléctrica estática se anula, es decir:

$$\sigma_{\alpha\beta}^{\text{DC}}(T = 0) \equiv \lim_{T \rightarrow 0} \lim_{\omega \rightarrow 0} \lim_{|q| \rightarrow 0} \text{Re} \{ \sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \omega) \} = 0 \quad (3.1)$$

Por otro lado, un material será metal si se observa el siguiente comportamiento:

$$\text{Re} \{ \sigma_{\alpha\beta}(T = 0, \omega \rightarrow 0) \} = (\mathcal{D}_c)_{\alpha\beta} \frac{\tau}{\pi(1 + \omega^2 \tau^2)} : \text{Drude metal} \quad (3.2)$$

Donde  $(\mathcal{D}_c)_{\alpha\beta}$  denota el peso de Drude y  $\tau$  es el tiempo de dispersión típico para colisiones no correlacionadas de electrones como por ejemplo colisiones con impurezas.

Observaciones:

- Según la Teoría de Drude,  $(\mathcal{D}_c)_{\alpha\beta} = \pi e^2 \left(\frac{n}{m^*}\right) \delta_{\alpha\beta}$  donde “e” es la carga del electrón, “n” es la concentración de portadores de carga y  $m^*$  es la masa efectiva [7].
- Si no hay dispersión de electrones, el comportamiento del metal es ideal y nos lleva a la siguiente ecuación.

$$\text{Re} \{ \sigma_{\alpha\beta}(T = 0, \omega \rightarrow 0) \} = (\mathcal{D}_c)_{\alpha\beta} \delta(\omega) : \text{ideal metal} \quad (3.3)$$

- Es solo en el límite a bajas temperaturas cuando se puede identificar a los semiconductores como aislantes y a los semimetales como metales [7].
- Existe una transición brusca de entre metal y aislante solo a temperatura cero, donde estas dos fases están realmente definidas [7].

Esta restricción de temperatura 0 y campos eléctricos externos débiles permite identificar 2 categorías básicas de aislantes:

- I. Aislantes debido a la interacción ion-electrón
- II. Aislantes debido a la interacción electrón-electrón

Los de la primera categoría pueden ceñirse a la teoría *single-electron* y tiene 3 principales subdivisiones:

1. Bloch-Wilson o aislantes de banda originados de la interacción de los electrones con el potencial de los iones.
2. Aislantes de Peiels originados de la interacción de los electrones con las deformaciones de redes estáticas.
3. Aislantes de Anderson originados por la presencia de desorden, como por ejemplo, los electrones interactuando con impurezas u otras imperfecciones de la red.

Por otro lado, los aislantes originados de la interacción mutua de los electrones son conceptualmente diferentes. Aquí, siempre se tiene que resolver un problema con muchos electrones. La cuarta clase de aislante lo constituye:

#### 4. Aislantes de Mott originados de la interacción electrón-electrón

Observación: Los aislantes de Mott pueden subdividirse a su vez en aislantes de Mott-Heisenberg y Mott-Hubbard dependiendo de si existe o no un largo orden en la carga o en la densidad de espín en los electrones [7].

### 3.2 *Gap Criterion* para aislantes

De acuerdo con la teoría de bandas, los electrones dentro de un sólido tienen niveles discretos de energía que se combinan en bandas o grupos. La banda de valencia contiene electrones que están unidos a la estructura atómica del material, mientras que la banda de conducción contiene electrones a más altas energías y estos son libres de moverse. Con la aplicación de energía, un electrón puede ser promovido de la banda de valencia a la banda de conducción, dejando un *hole*.

En general, un electrón y un *hole* interactúan entre sí de manera que es muy complicado describir la excitación colectiva *hole*-electrón. Preferiríamos relacionar las propiedades conductoras de un sistema únicamente a la excitación del electrón. Así, solo tendríamos que agregar o quitar electrones del sistema para estudiar la diferencia de energía en los sistemas con  $N$  y  $N \pm 1$  electrones. Esto es válido si el movimiento entre el electrón y el *hole* no está correlacionado. De esta manera, la excitación *hole*-electrón puede desligarse como la superposición de 2 partículas individuales. Además, las propiedades de conducción están directamente relacionados a la excitación del electrón. Esto implica que en un aislante hay un *gap* para las excitaciones del *single-electron* (*gap criterion*) [7].

Observación:

- Se debe tener mucho cuidado al aplicar el *gap criterion* pues en algunos casos fallará.

Por ejemplo, al excitar un sistema que tiene electrones enlazados en pares.

Bajo estas precauciones, usaremos el *gap criterion* para un aislante para todos nuestros sistemas, incluidos los sistemas de muchos electrones con interacciones repulsivas. Así, los potenciales químicos  $\mu^+$  y  $\mu^-$  son las mínimas energías que se necesitan para añadir un electrón al estado base con  $N$  y  $(N-1)$  electrones, respectivamente.

$$\mu^+(\lambda) = E_0(N + 1, \lambda) - E_0(N, \lambda) \quad (3.4)$$

$$\mu^-(\lambda) = E_0(N, \lambda) - E_0(N - 1, \lambda) \quad (3.5)$$

Aquí  $\lambda$  denota el conjunto de parámetros que caracterizan nuestro sistema, como por ejemplo la presión o concentración de electrones. Entonces, el *gap* de los estados portadores de carga viene dado por:

$$\Delta(\lambda) = (\mu^+(\lambda) - \mu^-(\lambda))_{\text{ext}} \quad (3.6)$$

Finalmente, el *gap criterion* nos lleva a:

$$\Delta(\lambda) > 0 \quad : \quad \text{insulator} \quad (3.7)$$

Observación:

- La anterior definición solo es válida a temperatura cero. A temperaturas finitas, es un poco más complicado asignarle un significado al *gap*.

### 3.3 *Electrostatic Screening en un gas de Fermi*

Si una carga eléctrica es introducida en un metal, por ejemplo a través de la inclusión de portadores de carga, entonces en la vecindad de esta carga habrá una perturbación en la

concentración de electrones. Una perturbación local del potencial  $\delta U$  (donde se asume que  $|e\delta U| \ll E_F$ ) produce un incremento local en la densidad de estados de la parábola  $D(E)$  por una cantidad  $e\delta U$  [8].

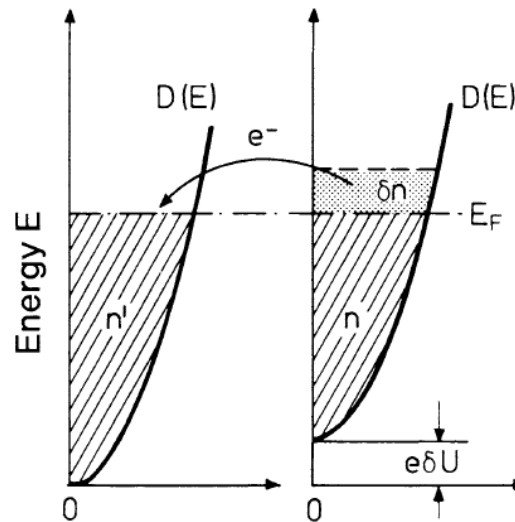


Figura 24. Efectos de la perturbación local  $\delta U$  en un gas de Fermi de electrones libres [8].

Entonces, cuando hay una perturbación de potencial, algunos electrones deben sobrepasar la energía de Fermi para que el nivel de Fermi permanezca constante sobre todo el cristal. Cuando el potencial  $\delta U$  no es muy grande, el cambio en la concentración de electrones viene dada por la fórmula [8]:

$$\delta n(\mathbf{r}) = D(E_F)|e|\delta U(\mathbf{r}) \quad (3.8)$$

Uno puede asumir que la variación de potencial  $\delta U$  es causado principalmente por la concentración de cargas inducidas  $\delta n$ . Entonces,  $\delta n$  está relacionado a  $\delta U$  por la ecuación de Poisson (es análogo a lo que se hace con el potencial eléctrico  $V$  y la densidad de carga  $\rho$ ) [8]:

$$\nabla^2(\delta U) = \frac{-\delta \rho}{\epsilon_0} \quad (3.9)$$

$$\nabla^2(\delta U) = \frac{e}{\epsilon_0} \delta n \quad (3.10)$$

$$\nabla^2(\delta U) = \frac{e^2}{\epsilon_0} D(E_F) \delta U \quad (3.11)$$

$$\nabla^2(\delta U) = \lambda^2 \delta U \quad , \quad \lambda^2 = e^2 D(E_F) / \epsilon_0 \quad (3.12)$$

La ecuación diferencial para el *screening potencial*  $\delta U$  tiene solución no trivial en coordenadas esféricas.

$$\delta U(r) = \alpha e^{-\lambda r} / r \quad (3.13)$$

Observación:

- Las coordenadas esféricas son elección óptima para lidiar con defectos tipo punto.

Para una carga  $e$ , tendríamos que el valor de alfa es  $\alpha = \frac{e}{4\pi\epsilon_0}$  ya que cuando  $\lambda \rightarrow 0$  el *screening effect* desaparece y solo se debería obtener el potencial de Coulomb. Asimismo, se definirá la cantidad  $r_{TF} = \frac{1}{\lambda}$ , la cual es conocida como Thomas-Fermi *screening length* [8]:

$$r_{TF} = [e^2 D(E_F) / \epsilon_0]^{-1/2} \quad (3.14)$$

Para el caso especial del modelo de gas de electrones libres, tenemos que la densidad de estados y la energía de Fermi son:

$$D(E_F) = \frac{3}{2} n / E_F \quad \text{and} \quad E_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3} \quad (3.15)$$

$$D(E_F) = \frac{1}{2\pi^2} \frac{2m}{\hbar^2} (3\pi^2 n)^{1/3} \quad (3.16)$$

Además, el Thomas-Fermi *screening length* toma el valor de:

$$\frac{1}{r_{TF}^2} = e^2 D(E_F) / \epsilon_0 \quad (3.17)$$

$$\frac{1}{r_{TF}^2} = \frac{me^2}{\pi^2 \hbar^2 \epsilon_0} (3\pi^2 n)^{1/3} \quad (3.18)$$

$$\frac{1}{r_{TF}} \simeq 2 \frac{n^{1/6}}{a_0^{1/2}} \quad (3.19)$$

$$r_{TF} \simeq 0.5 \left( \frac{n}{a_0^3} \right)^{-1/6} \quad (3.20)$$

Aplicaremos este resultado al cobre. Para este material, la concentración de electrones es de  $n = 8.5 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$  entonces el Thomas-Fermi *screening length* es de  $r_{TF} = 0.55$ . El proceso descrito aquí explica por qué los electrones de valencia de mayor energía de un metal no están localizados. Estos electrones no pueden mantenerse dentro del potencial que generan los núcleos. Usando estos argumentos, es posible entender la transición entre metales- aislantes conocida como transición de Mott (principalmente diremos que  $r_{TF}$  es inversamente proporcional a  $n$ , ver ecuación 3.20) [8].

Encima de cierta densidad crítica de electrones  $n_c$  el *screening length*  $r_{TF}$  es tan pequeño que los electrones no logran mantener un *bound state*, generando un comportamiento metálico. En otras palabras, el potencial generado por las cargas introducidas es de tan corto alcance que no logra afectar a los electrones que están a su alrededor. Como los electrones no logran enlazarse

se comportan como electrones libres, propiedad característica de los metales. Por otro lado, debajo de esta concentración crítica el potencial de las cargas introducidas se extiende lo suficientemente lejos como para formar enlaces con facilidad [8]. Esto quiere decir que manipulando la concentración de electrones un material puede pasar de un carácter metálico a aislante y viceversa.

Para hacer una simple estimación de cuando el material se comporta como aislante, asumiremos que Thomas-Fermi *screening length*  $r_{TF}$  debe ser mucho mayor que el radio de Bohr  $a_0$ .

$$r_{TF}^2 \gg a_0^2 \quad (3.21)$$

$$\frac{1}{4} \frac{a_0}{n^{1/3}} \gg a_0^2 \quad (3.22)$$

$$n^{-1/3} \gg 4a_0 \quad (3.23)$$

Esta estimación, originalmente propuesta por Mott, predice que un sólido perderá su carácter metálico cuando la separación promedio de electrones  $n^{-\frac{1}{3}}$  es mucho más grande que 4 veces el radio de Bohr. Hoy en día se cree que los saltos bruscos observados en la conductividad de óxidos metálicos (como ITO), vidrios y semiconductores amorfos pueden explicarse en términos del mecanismo anterior [8].



## 4. APROXIMACIÓN DE MEDIO EFECTIVO

### 4.1 Campo eléctrico interno

Los dieléctricos pueden ser representados como un conjunto de dipolos desordenados. Sin embargo, en presencia de un campo eléctrico externo, todos los dipolos se ordenan e inducen un campo eléctrico. Así, el campo eléctrico total dentro del dieléctrico es mucho más fuerte.

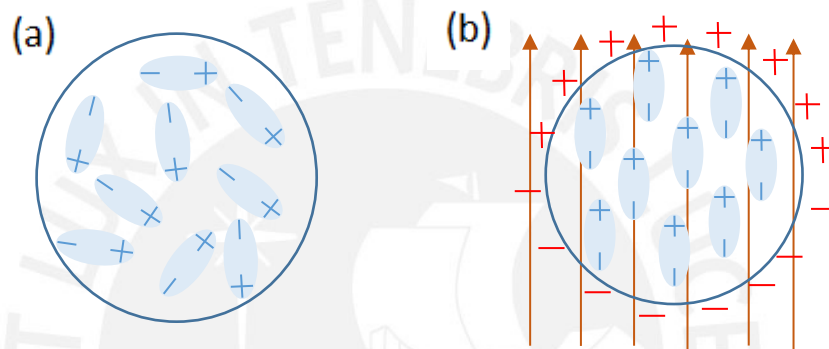


Figura 25. (a) Esfera dieléctrica no polarizada y (b) Esfera dieléctrica polarizada

En la siguiente figura se muestra una esfera dieléctrica dentro de un condensador y el objetivo es calcular el campo eléctrico total dentro de la esfera.

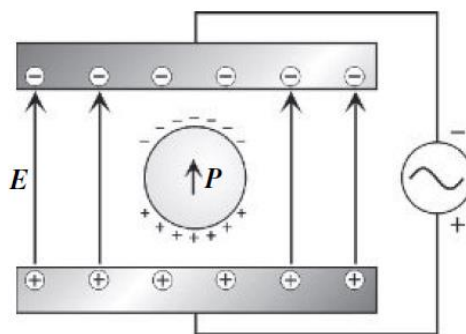


Figura 26. Esfera dieléctrica dentro de un capacitor [6].

Observación:

- El campo eléctrico de un condensador no es perfectamente vertical, es solo una aproximación. Pero funciona muy bien si las placas están muy juntas o la esfera dieléctrica es pequeña comparado con el tamaño de las placas.

En la siguiente demostración no se halla el campo eléctrico en cada punto de la esfera, solo en el centro.

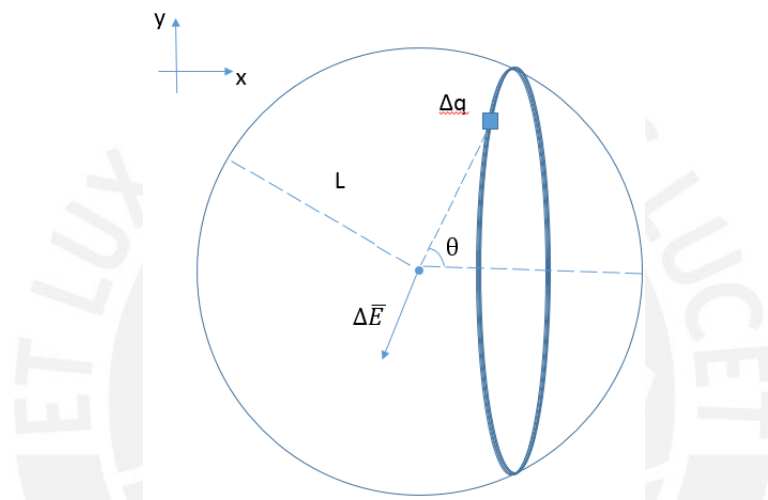


Figura 27. Esquema de esfera dieléctrica con carga arbitraria  $\Delta q$ .

Cuando un dieléctrico está polarizado, todas las cargas dentro del material se anulan y únicamente queda carga eléctrica en la superficie del material. En el caso de una esfera dieléctrica, la mitad queda cargada positivamente y la otra, negativamente. Entonces, se toma una porción arbitraria de carga eléctrica en la superficie esférica y se calcula el campo eléctrico que produce en el centro de la esfera. Por electrostática se tiene:

$$\Delta \vec{E} = \frac{k\Delta q}{L^2} \hat{u}_r \quad (4.1)$$

La simetría de la esfera hace que la componente del campo eléctrico en la dirección “y” se anule. Para visualizar mejor este fenómeno, en la figura 28 se han graficado 2 cargas  $\Delta q$

diametralmente opuestas, los campos eléctricos que cada uno produce y sus componentes. Notamos que las componentes en la dirección “y” son opuestas y sus módulos son iguales, así que se anulan. Este resultado se generaliza para todas las cargas del anillo, concluyéndose que el campo eléctrico en “y” desaparece.

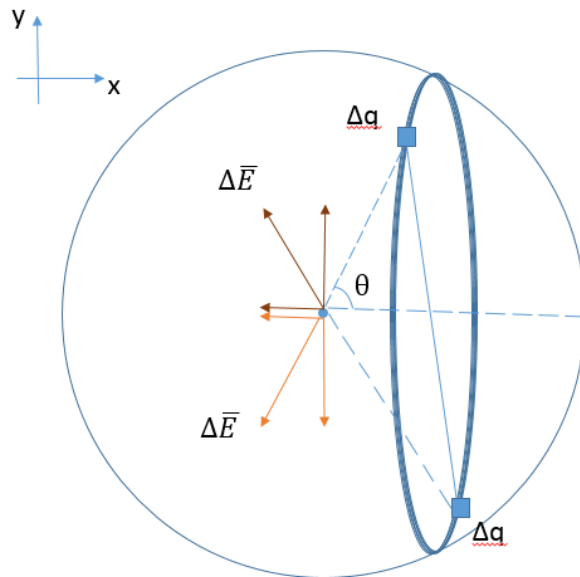


Figura 28. Esquema de esfera dieléctrica con 2 cargas arbitrarias  $\Delta q$  diametralmente opuestas.

Entonces, solo se trabaja con la componente “x” del campo eléctrico.

$$\Delta \bar{E}_x = \frac{k\Delta q}{L^2} \cos\theta \hat{u}_x \quad (4.2)$$

Se deja de trabajar vectorialmente y la ecuación (4.2) se reescribe así:

$$\Delta E_x = \frac{k\Delta q}{L^2} \cos\theta \quad (4.3)$$

La contribución de todo el anillo es la suma de los campos eléctricos producidos por cada una de las cargas infinitesimales.

$$\sum \Delta E_x = \frac{k \sum \Delta q}{L^2} \cos\theta \quad (4.4)$$

Formalmente, la ecuación (4.4) se escribe en función de diferenciales.

$$dE_x = \frac{k dq}{L^2} \cos\theta \quad (4.5)$$

Se buscará integrar esta ecuación en  $\theta$ , para eso se necesitan las siguientes ecuaciones:

$$\sigma = \frac{dq}{dS} \quad , \quad dS = (2 \pi L \sen\theta)(L d\theta) \quad , \quad \begin{aligned} \sigma &= \bar{P} \cdot \hat{n} \\ \sigma &= P \cos\theta \end{aligned} \quad (4.6)$$

Reemplazando en (4.5) se obtiene:

$$dE_x = \frac{k(P \cos\theta)(2 \pi L \sen\theta)(L d\theta)}{L^2} \cos\theta \quad (4.7)$$

El resultado de integrar (4.7) nos da el campo eléctrico en el centro del anillo. A este campo lo llamaremos campo eléctrico interno.

$$E_{INTERNO} = \frac{P}{3\epsilon_0} \quad (4.8)$$

#### 4.2 Polarización (1 material, en el vacío)

Una vez calculado el campo eléctrico interno, se hallará la polarización en función del campo eléctrico externo. El campo eléctrico total es la suma de ambos campos.

$$E_{TOTAL} = E_{EXTERNO} + E_{INTERNO} \quad (4.9)$$

Reemplazando la ecuación (4.8) en (4.9) se obtiene:

$$E_{TOTAL} = E_{EXTERNO} + \frac{P}{3\epsilon_0} \quad (4.10)$$

Por definición, la polarización es el producto de la polarizabilidad y el campo eléctrico total.

$$P_{1ELECTRÓN} = \alpha E_{TOTAL} \quad , \quad \text{donde } \alpha \text{ es la polarizabilidad} \quad (4.11)$$

En esta sección, solo trabajaremos con una esfera dieléctrica compuesta de 1 solo material. Asumimos que el material está compuesto de  $N_e$  electrones y que su polarización total es lineal, es decir, la polarización de cada uno de los dipolos tiene la misma dirección. Entonces:

$$P_{N_eELECTRONES} = N_e \alpha E_{TOTAL} \quad (4.12)$$

$$E_{TOTAL} = \frac{P}{N_e \alpha} \quad (4.13)$$

Reemplazando la ecuación (4.13) en (4.10) se obtiene la polarización.

$$\frac{P}{N_e \alpha} = E_{EXTERNO} + \frac{P}{3\epsilon_0} \quad (4.14)$$

$$P = \frac{N_e \alpha E_{EXTERNO}}{1 - \frac{N_e \alpha}{3\epsilon_0}} \quad (4.15)$$

### 4.3 Permitividad eléctrica relativa (1 material, en el vacío)

La permitividad eléctrica puede ser calculada directamente con la siguiente fórmula.

$$\epsilon = 1 + \frac{P}{\epsilon_0 E_{EXTERNO}} \quad (4.16)$$

Observación:

- Esta fórmula solo puede ser usada cuando la esfera dieléctrica está expuesta al vacío.

Reemplazando la ecuación (4.15) en (4.16) se obtiene:

$$\frac{\epsilon}{1} = \frac{\epsilon_0 + \frac{2}{3} N_e \alpha}{\epsilon_0 - \frac{1}{3} N_e \alpha} \quad (4.17)$$

A través de aritmética básica, se podría reescribir la ecuación (4.17) a:

$$\frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon + 2} = \frac{(\varepsilon_0 + \frac{2}{3} N_e \alpha) - (\varepsilon_0 - \frac{1}{3} N_e \alpha)}{(\varepsilon_0 + \frac{2}{3} N_e \alpha) + 2(\varepsilon_0 - \frac{1}{3} N_e \alpha)} \quad (4.18)$$

$$\frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon + 2} = \frac{N_e \alpha}{3\varepsilon_0} \quad (4.19)$$

#### 4.4 Permitividad eléctrica relativa (2 materiales, en el vacío)

Se generalizará el problema inicial. Ahora la esfera dieléctrica está compuesta por 2 materiales diferentes pero sigue expuesta al vacío.

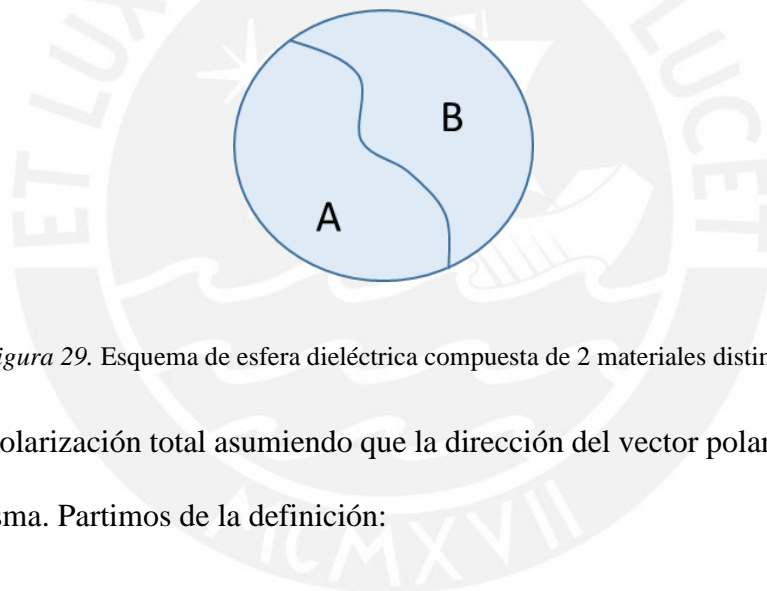


Figura 29. Esquema de esfera dieléctrica compuesta de 2 materiales distintos

Se recalcula la polarización total asumiendo que la dirección del vector polarización en ambos medios es la misma. Partimos de la definición:

$$P_{1 \text{ ELECTRÓN}} = \alpha E_{TOTAL} \quad , \quad \text{donde } \alpha \text{ es la polarizabilidad} \quad (4.20)$$

Asumimos que el número de electrones en A y B es  $N_A$  y  $N_B$ , respectivamente. Entonces, la polarización total en cada material es:

$$P_{N_A \text{ ELECTRONES}} = P_A = N_A \alpha_A E_{TOTAL} \quad (4.21)$$

$$P_{N_B \text{ ELECTRONES}} = P_B = N_B \alpha_B E_{TOTAL} \quad (4.22)$$

Sumando ambas contribuciones se obtiene la polarización total.

$$P = (N_A \alpha_A + N_B \alpha_B) E_{TOTAL} \quad (4.23)$$

Para calcular la permitividad eléctrica relativa se utiliza la ecuación (4.19) pero para evitar realizar nueva cuentas se realiza un cambio de variable. La ecuación (4.23) queda así:

$$P = N_e \alpha E_{TOTAL} \quad , \quad \text{donde } N_e \alpha = N_A \alpha_A + N_B \alpha_B \quad (4.24)$$

La ecuación (4.24) es similar a la ecuación (4.12). Además, con la ecuación (4.12) se obtuvo (4.19), así que este resultado también será válido para la ecuación (4.24). Reemplazando (4.24) en (4.19) se obtiene:

$$\frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon + 2} = \frac{N_A \alpha_A + N_B \alpha_B}{3\varepsilon_0} \quad (4.25)$$

Sea N el número total de electrones en el material. Multiplicando y dividiendo por N la parte derecha de la ecuación (4.25), se obtiene:

$$\frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon + 2} = \frac{N_A}{N} \frac{N \alpha_A}{3\varepsilon_0} + \frac{N_B}{N} \frac{N \alpha_B}{3\varepsilon_0} \quad (4.26)$$

Se definen permitividades relativas teóricas  $\varepsilon_A$  y  $\varepsilon_B$ . Estas son las permitividades eléctricas que tendría el material si todos los electrones tuviesen polarizabilidad  $\alpha_A$  o  $\alpha_B$ , respectivamente. Entonces, usamos la ecuación (4.19).

$$\frac{\varepsilon_A - 1}{\varepsilon_A + 2} = \frac{N_e \alpha_A}{3\varepsilon_0} \quad (4.27)$$

$$\frac{\varepsilon_B - 1}{\varepsilon_B + 2} = \frac{N_e \alpha_B}{3\varepsilon_0} \quad (4.28)$$

Reemplazando (4.27) y (4.28) en (4.26) se obtiene:

$$\frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon + 2} = \frac{N_A}{N} \frac{\varepsilon_A - 1}{\varepsilon_A + 2} + \frac{N_B}{N} \frac{\varepsilon_B - 1}{\varepsilon_B + 2} \quad (4.29)$$

Asumiendo que el volumen de cada material es proporcional al número de electrones, la ecuación (4.29) queda así:

$$\frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon + 2} = \frac{V_A}{V_{TOTAL}} \frac{\varepsilon_A - 1}{\varepsilon_A + 2} + \frac{V_B}{V_{TOTAL}} \frac{\varepsilon_B - 1}{\varepsilon_B + 2} \quad (4.30)$$

O en función de fracciones volumétricas:

$$\frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon + 2} = f_A \frac{\varepsilon_A - 1}{\varepsilon_A + 2} + f_B \frac{\varepsilon_B - 1}{\varepsilon_B + 2} \quad , \text{ Donde: } f_A \text{ es la fracción de volumen del material A} \\ f_B \text{ es la fracción de volumen del material B} \quad (4.31)$$

#### 4.5 Permitividad eléctrica relativa (N materiales, en un medio $\varepsilon_h$ )

Si el medio que rodea a la esfera dieléctrica no es el vacío, entonces la ecuación (4.16) ya no puede ser utilizada.

$$\varepsilon' = 1 + \frac{P}{\varepsilon_0 E_{EXTERNO}} \quad \text{donde } \varepsilon' = \frac{\varepsilon}{\varepsilon_h} \quad (4.32)$$

La ecuación (4.32) es la versión generalizada de la ecuación (4.16), pero se la ha escrito de tal manera que tenga la misma forma que la ecuación (4.16). Así, se pueden reciclar resultados anteriores y evitar más cuentas.



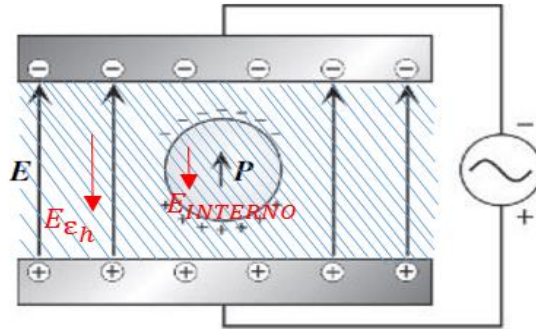


Figura 30. Esquema de esfera dieléctrica rodeada de un material dieléctrico

Si se tiene una esfera dieléctrica homogénea compuesta de 1 solo material y el medio que lo rodea es un dieléctrico con permitividad relativa  $\epsilon_h$ , entonces reciclando la ecuación (4.19), obtenemos:

$$\frac{\epsilon' - 1}{\epsilon' + 2} = \frac{N_e \alpha}{3\epsilon_0} \quad \text{donde } \epsilon' = \frac{\epsilon}{\epsilon_h} \quad (4.33)$$

$$\frac{\epsilon - \epsilon_h}{\epsilon + 2\epsilon_h} = \frac{N_e \alpha}{3\epsilon_0} \quad (4.34)$$

Si se tiene una esfera dieléctrica compuesta de 2 materiales distintos y el medio que lo rodea es un dieléctrico con permitividad relativa  $\epsilon_h$ , entonces reciclando la ecuación (4.31), obtenemos:

$$\frac{\epsilon' - 1}{\epsilon' + 2} = f_A \frac{\epsilon'_A - 1}{\epsilon'_A + 2} + f_B \frac{\epsilon'_B - 1}{\epsilon'_B + 2} \quad (4.35)$$

$$\frac{\epsilon - \epsilon_h}{\epsilon + 2\epsilon_h} = f_A \frac{\epsilon_A - \epsilon_h}{\epsilon_A + 2\epsilon_h} + f_B \frac{\epsilon_B - \epsilon_h}{\epsilon_B + 2\epsilon_h} \quad (4.36)$$

La ecuación (4.36) permite describir 2 modelos: el modelo de Maxwell Garnett (MG) y el *effective medium approximation* (EMA). Por un lado, en el modelo de Maxwell Garnett se

asume que el material dieléctrico que está fuera de la esfera se introduce en uno de los materiales de la esfera, por ejemplo, en el material A. Entonces,  $\epsilon_A = \epsilon_h$  y reemplazando en (4.36) se obtiene:

$$\frac{\epsilon - \epsilon_A}{\epsilon + 2\epsilon_A} = (1 - f_A) \frac{\epsilon_B - \epsilon_A}{\epsilon_B + 2\epsilon_A} \quad (\text{MG}) \quad (4.37)$$

Por otro lado, en el *effective medium approximation* se asume que la esfera dieléctrica es tan grande que ocupa todo el espacio dentro del capacitor. Así que  $\epsilon = \epsilon_h$  y reemplazando en (4.36) se obtiene:

$$0 = f_A \frac{\epsilon_A - \epsilon}{\epsilon_A + 2\epsilon} + f_B \frac{\epsilon_B - \epsilon}{\epsilon_B + 2\epsilon} \quad (\text{EMA}) \quad (4.38)$$

Aún falta encontrar la ecuación de permitividad dieléctrica para una esfera compuesta de N materiales distintos y rodeada por un medio diferente al vacío. Partimos de la definición de polarización:

$$P_{1ELECTRÓN} = \alpha E_{TOTAL} \quad , \quad \text{donde } \alpha \text{ es la polarizabilidad} \quad (4.39)$$

Asumimos que cada material tiene  $N_1, N_2, \dots, N_n$  electrones y que la dirección del vector de polarización en cada material es la misma. Entonces, la polarización total de cada material es:

$$\begin{aligned} P_{N_1 ELECTRONES} &= P_1 = N_1 \alpha_1 E_{TOTAL} \\ P_{N_2 ELECTRONES} &= P_2 = N_2 \alpha_2 E_{TOTAL} \\ &\dots \\ P_{N_n ELECTRONES} &= P_n = N_n \alpha_n E_{TOTAL} \end{aligned} \quad (4.40)$$

Sumando todas las contribuciones se obtiene:

$$P = \sum N_i \alpha_i E_{TOTAL} \quad (4.41)$$

Para poder reutilizar ecuaciones anteriores es necesario un cambio de variable:

$$P = N_e \alpha E_{TOTAL} \quad , \quad \text{Donde: } N_e \alpha = \sum N_i \alpha_i \quad (4.42)$$

Las ecuaciones (4.12) y (4.42) son iguales. La ecuación (4.34) se dedujo a partir de (4.12) así que podemos aplicar (4.42) en (4.34).

$$\frac{\varepsilon - \varepsilon_h}{\varepsilon + 2\varepsilon_h} = \frac{N_e \alpha}{3\varepsilon_0} \quad , \quad \text{Donde: } N_e \alpha = \sum N_i \alpha_i \quad (4.43)$$

$$\frac{\varepsilon - \varepsilon_h}{\varepsilon + 2\varepsilon_h} = \frac{\sum N_i \alpha_i}{3\varepsilon_0} \quad (4.44)$$

Sea N el número total de electrones que posee la esfera dieléctrica. Multiplicando y dividiendo por N la parte derecha de la ecuación (4.44), se obtiene:

$$\frac{\varepsilon - \varepsilon_h}{\varepsilon + 2\varepsilon_h} = \sum \frac{N_i N \alpha_i}{N 3\varepsilon_0} \quad (4.45)$$

Si se asume que el número de electrones es proporcional al volumen y se utiliza fracciones volumétricas para describir la anterior ecuación, se obtiene:

$$\frac{\varepsilon - \varepsilon_h}{\varepsilon + 2\varepsilon_h} = \sum f_i \frac{\varepsilon_i - \varepsilon_h}{\varepsilon_i + 2\varepsilon_h} \quad (4.46)$$

La ecuación (4.46) engloba cada uno de los casos que hemos tratado anteriormente.

Entonces, aplicando EMA ( $\varepsilon = \varepsilon_h$ ) para N materiales, se obtiene la siguiente ecuación:

$$0 = \sum f_i \frac{\varepsilon_i - \varepsilon}{\varepsilon_i + 2\varepsilon} \quad (\text{EMA general}) \quad (4.47)$$

La ecuación (4.47) puede ser resuelta con “fórmula general” hasta  $N = 4$  (se tendrá que resolver una ecuación de cuarto grado o grado menor). Para  $N > 4$ , la ecuación debe ser resuelta numéricamente (No hay una fórmula general para ecuaciones de quinto grado a más). Para probar la anterior sentencia debemos multiplicar la ecuación (4.47) por  $\prod_{j=1}^N (\varepsilon_j + 2\varepsilon)$  y simplificar.

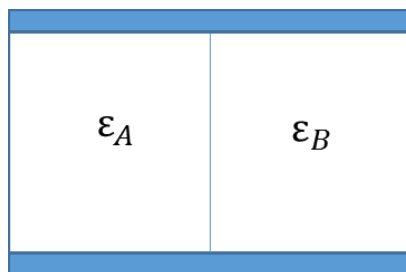
$$0 = \left( \sum_{i=1}^N f_i \frac{\varepsilon_i - \varepsilon}{\varepsilon_i + 2\varepsilon} \right) \prod_{j=1}^N (\varepsilon_j + 2\varepsilon) \quad (4.48)$$

$$0 = \sum_1^N \left( f_i (\varepsilon_i - \varepsilon) \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N (\varepsilon_j + 2\varepsilon) \right) \quad (4.49)$$

Cada uno de los términos de la sumatoria de la ecuación (4.49) es de grado  $N$ . Entonces, como máximo la ecuación será de grado  $N$ .

#### 4.6 Fórmula única para 2 medios materiales

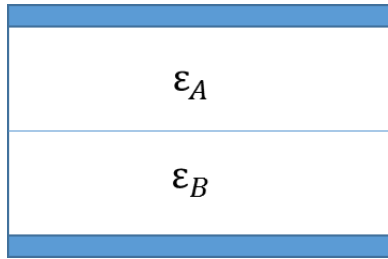
En esta sección, se analizan condensadores con dieléctricos compuestos únicamente de 2 materiales. Los ejemplos clásicos son los condensadores en serie y en paralelo.



*Paralelo*

$$\varepsilon = f_A \varepsilon_A + f_B \varepsilon_B$$

Figura 31. Esquema de un condensador con dieléctrico en paralelo y su fórmula

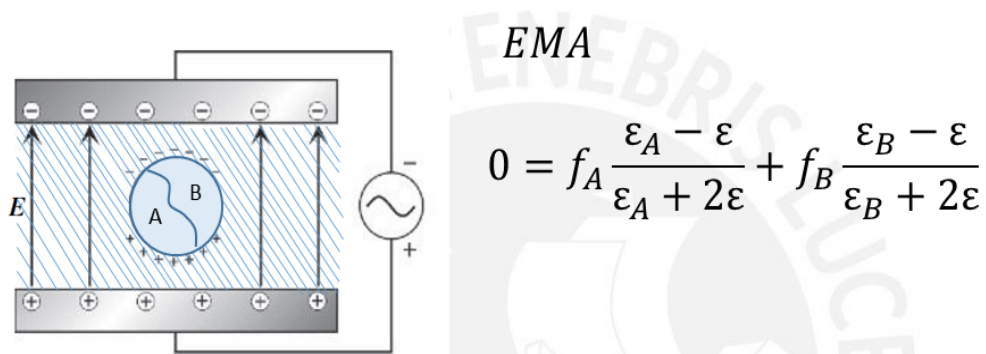


*Serie*

$$\varepsilon^{-1} = f_A \varepsilon_A^{-1} + f_B \varepsilon_B^{-1}$$

Figura 32. Esquema de un condensador con dieléctrico en serie y su fórmula

A estos ejemplos clásicos, se agrega el caso de la esfera dieléctrica aproximado con EMA.



$$0 = f_A \frac{\varepsilon_A - \varepsilon}{\varepsilon_A + 2\varepsilon} + f_B \frac{\varepsilon_B - \varepsilon}{\varepsilon_B + 2\varepsilon}$$

Figura 33. Esquema de un condensador, una esfera dieléctrica compuesta de 2 materiales y la fórmula de EMA

Todas estas fórmulas pueden ser agrupadas en 1 sola:

$$\varepsilon = \frac{\varepsilon_A \varepsilon_B + k \varepsilon_h (f_A \varepsilon_A + f_B \varepsilon_B)}{k \varepsilon_h + (f_A \varepsilon_B + f_B \varepsilon_A)} \quad \text{Donde:} \quad k = \frac{1 - q}{q} \quad (4.50)$$

*q es el factor de apantallamiento*

Las ecuaciones en paralelo, EMA y en serie son deducidas cuando los factores de apantallamientos “q” son  $0, \frac{1}{3}$  y 1, respectivamente.

Observación:

- Si  $q = 0$  entonces  $k \rightarrow \infty$ . Solo en este caso la ecuación (4.50) debe ser trabajada con límites.

Para entender un poco mejor la función del factor de apantallamiento, se realizan gráficos y ecuaciones asumiendo que  $\epsilon_A = 2$  y  $\epsilon_B = 4$ .

Paralelo( $q = 0$ )

$$\epsilon = f_A \epsilon_A + f_B \epsilon_B$$

$$\epsilon = (1 - f_B)2 + f_B 4$$

EMA( $q = 1/3, \epsilon_A = \epsilon$ )

$$0 = f_A \frac{\epsilon_A - \epsilon}{\epsilon_A + 2\epsilon} + f_B \frac{\epsilon_B - \epsilon}{\epsilon_B + 2\epsilon}$$

$$\epsilon = \frac{3f_B + \sqrt{9f_B^2 + 16}}{2}$$

Serie( $q = 1$ )

$$\epsilon^{-1} = f_A \epsilon_A^{-1} + f_B \epsilon_B^{-1}$$

$$\epsilon = [(1 - f_B) \frac{1}{2} + f_B \frac{1}{4}]^{-1}$$

Observación:

- Cada una de las ecuaciones ha sido expresadas en función de  $f_B$ . Recordar que  $f_B + f_A = 1$ .

Con las ecuaciones anteriores, se puede graficar  $\epsilon$  vs  $f_B$ .

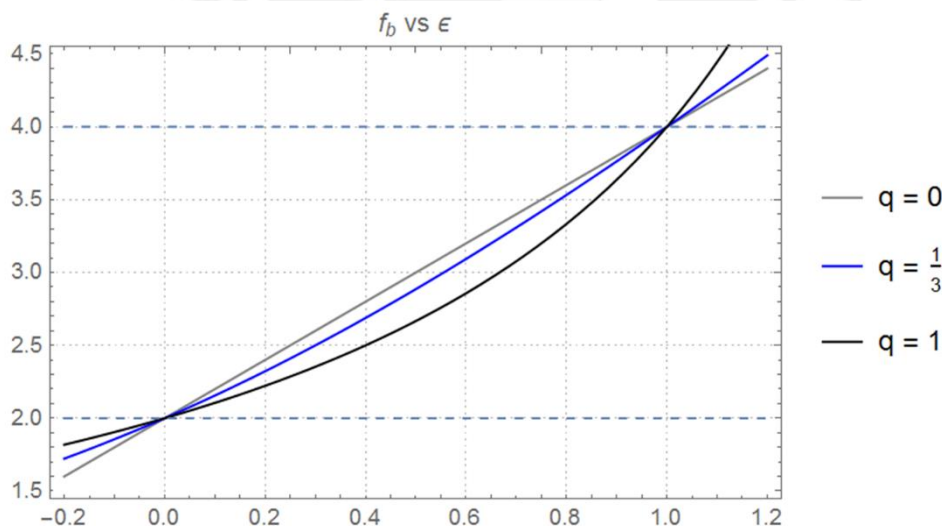


Figura 34. Gráfica  $\epsilon$  vs  $f_B$  para condensadores en paralelo ( $q = 0$ ), serie ( $q = 1$ ) y EMA ( $q = \frac{1}{3}$ ) cuando  $\epsilon_A = 2$  y  $\epsilon_B = 4$  elaborado en Wolfram Mathematica.

Cuando no hay efecto de apantallamiento ( $q = 0$ ), la constante dieléctrica ( $\epsilon$ ) es una recta. Sin embargo, el incremento del factor de apantallamiento hace que la constante dieléctrica sea menor. Para corroborar la hipótesis anterior, se grafican más casos. Se utiliza la ecuación (4.50)

cuando  $\varepsilon_A = 2$ ,  $\varepsilon_B = 4$ ,  $\varepsilon_h = \varepsilon$  y el factor de apantallamiento “q” va desde 0.1 a 0.9 en pasos de 0.1. La ecuación se resolvió computacionalmente y se tomó la solución positiva.

$$\text{Solve}\left[\left\{\varepsilon = \frac{ea\,eb + \kappa\,\varepsilon\,((1-fb)\,ea + fb\,eb)}{\kappa\,\varepsilon + ((1-fb)\,eb + fb\,ea)}\right\}, \varepsilon\right] // \text{FullSimplify}$$

$$\left\{\left\{\varepsilon \rightarrow \frac{-2 + fb + \kappa + fb\,\kappa - \sqrt{8\,\kappa + (-2 + fb + \kappa + fb\,\kappa)^2}}{\kappa}\right\}, \left\{\varepsilon \rightarrow \frac{-2 + fb + \kappa + fb\,\kappa + \sqrt{8\,\kappa + (-2 + fb + \kappa + fb\,\kappa)^2}}{\kappa}\right\}\right\}$$

Figura 35. Resolución de la ecuación (4.50) cuando  $\varepsilon_A = 2$ ,  $\varepsilon_B = 4$ ,  $\varepsilon_h = \varepsilon$  y para un  $k$  arbitrario elaborada en Wolfram Mathematica.

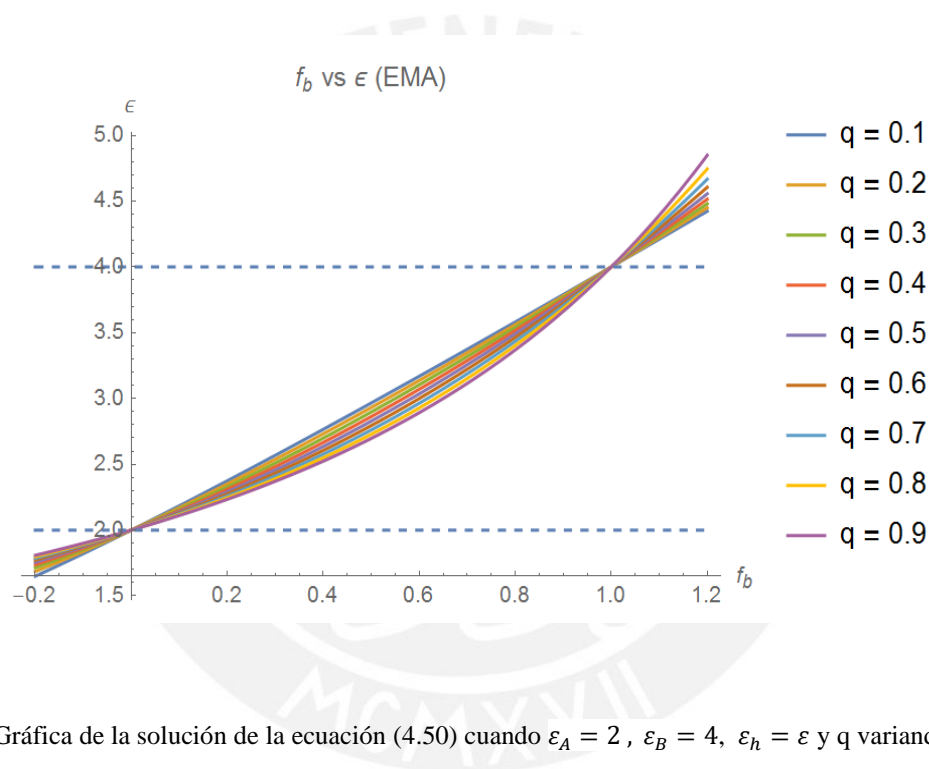


Figura 36. Gráfica de la solución de la ecuación (4.50) cuando  $\varepsilon_A = 2$ ,  $\varepsilon_B = 4$ ,  $\varepsilon_h = \varepsilon$  y  $q$  variando desde 0.1 a 0.9 en pasos de 0.1 elaborado en Wolfram Mathematica.

Con estas 9 gráficas se visualiza mejor que el efecto del factor de apantallamiento es disminuir el valor de la permitividad eléctrica  $\varepsilon$ .

Finalmente, se prueba que la ecuación general (4.50) describe una aproximación de EMA cuando  $\varepsilon_h = \varepsilon$  y  $q = \frac{1}{3}$ . Reemplazando estos valores en (4.50) se obtiene:

$$\varepsilon = \frac{\varepsilon_A\varepsilon_B + 2\varepsilon(f_A\varepsilon_A + f_B\varepsilon_B)}{2\varepsilon + (f_A\varepsilon_B + f_B\varepsilon_A)} \quad (4.51)$$

Se manipulará la ecuación (4.51) para llegar a la ecuación de EMA.

$$\begin{aligned} \varepsilon(2\varepsilon + (f_A\varepsilon_B + f_B\varepsilon_A)) &= \varepsilon_A\varepsilon_B + 2\varepsilon(f_A\varepsilon_A + f_B\varepsilon_B) \\ 2\varepsilon^2 + \varepsilon(f_A\varepsilon_B + f_B\varepsilon_A) &= \varepsilon_A\varepsilon_B + 2\varepsilon(f_A\varepsilon_A + f_B\varepsilon_B) , \quad f_A + f_B = 1 \\ 2\varepsilon^2(f_A + f_B) + \varepsilon(f_A\varepsilon_B + f_B\varepsilon_A) &= \varepsilon_A\varepsilon_B(f_A + f_B) + 2\varepsilon(f_A\varepsilon_A + f_B\varepsilon_B) \\ 2\varepsilon^2f_A + 2\varepsilon^2f_B + \varepsilon f_A\varepsilon_B + \varepsilon f_B\varepsilon_A &= \varepsilon_A\varepsilon_Bf_A + \varepsilon_A\varepsilon_Bf_B + 2\varepsilon f_A\varepsilon_A + 2\varepsilon f_B\varepsilon_B \\ f_A(2\varepsilon^2 + \varepsilon\varepsilon_B - \varepsilon_A\varepsilon_B - 2\varepsilon\varepsilon_A) + f_B(2\varepsilon^2 + \varepsilon\varepsilon_A - \varepsilon_A\varepsilon_B - 2\varepsilon\varepsilon_B) &= 0 \\ f_A(2\varepsilon + \varepsilon_B)(\varepsilon - \varepsilon_A) + f_B(2\varepsilon + \varepsilon_A)(\varepsilon - \varepsilon_B) &= 0 \\ f_A \frac{\varepsilon_A - \varepsilon}{\varepsilon_A + 2\varepsilon} + f_B \frac{\varepsilon_B - \varepsilon}{\varepsilon_B + 2\varepsilon} &= 0 \quad (EMA) \end{aligned}$$





## 5. Modelado de superficie rugosa

### 5.1 Rugosidad

La rugosidad puede ser caracterizada por las irregularidades de una superficie con respecto a su plano promedio. Se van a definir dos tipos de rugosidades según la proporción entre la longitud de onda de la luz incidente y el grado de rugosidad: macroscópicas y microscópicas. Se habla de rugosidad macroscópica cuando la longitud de la onda incidente es mucho mayor que el grado de rugosidad de la superficie. En este caso, gran parte de la luz se dispersa. Por otro lado, se habla de rugosidad microscópica cuando la longitud de la onda incidente es mucho menor que el grado de rugosidad de la superficie. Se trabajará principalmente con rugosidades microscópicas pues las capas rugosas pueden ser aproximadas con *effective medium approximation* [9].

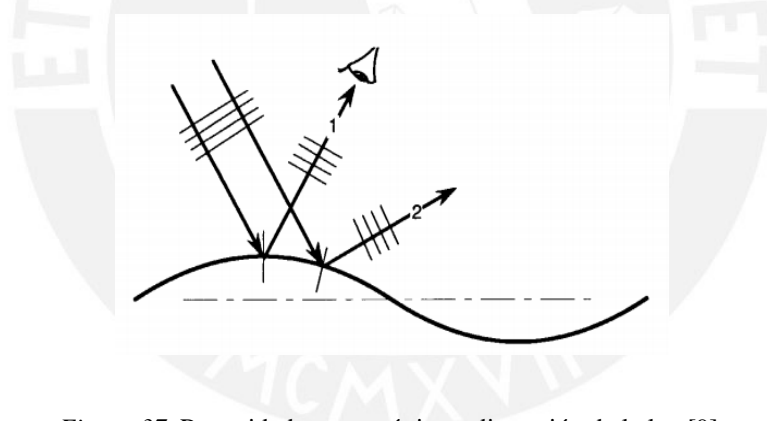


Figura 37. Rugosidad macroscópica y dispersión de la luz [9].

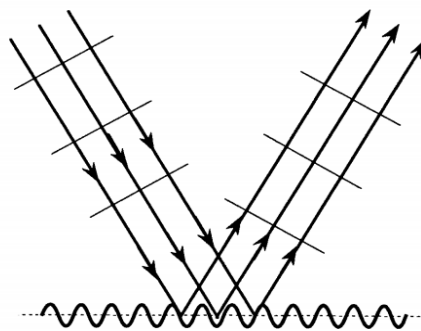


Figura 38. Rugosidad microscópica [9].

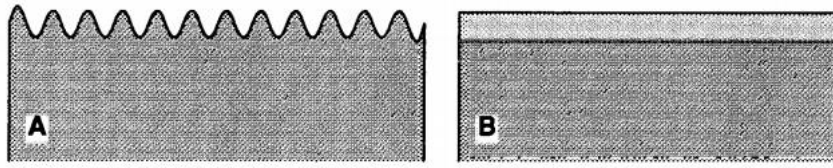


Figura 39. Aproximación de capa rugosa con EMA [6].

## 5.2 EMA en capas rugosas

La ecuación que describe un EMA es (4.38). Primero se asumirá que las fracciones volumétricas de ambos materiales es la misma. Luego se generalizará el resultado para fracciones volumétricas arbitrarias.

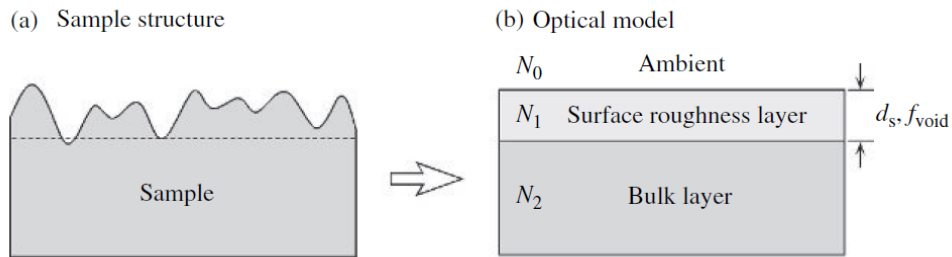


Figura 40. Imagen de la aproximación de la capa rugosa [6].

Asumiendo  $f_A = f_B = 0.5$  y reemplazando en (4.54) se obtiene:

$$0 = \frac{\epsilon_A - \epsilon}{\epsilon_A + 2\epsilon} + \frac{\epsilon_B - \epsilon}{\epsilon_B + 2\epsilon} \quad (5.1)$$

Esta ecuación es resuelta computacionalmente y se escoge la solución positiva.

$$\text{Solve}\left[\frac{\epsilon a - \epsilon}{\epsilon a + 2\epsilon} + \frac{\epsilon b - \epsilon}{\epsilon b + 2\epsilon} == 0, \epsilon\right]$$

$$\left\{\left\{\epsilon \rightarrow \frac{1}{8} \left(\epsilon a + \epsilon b - \sqrt{\epsilon a^2 + 34 \epsilon a \epsilon b + \epsilon b^2}\right)\right\}, \left\{\epsilon \rightarrow \frac{1}{8} \left(\epsilon a + \epsilon b + \sqrt{\epsilon a^2 + 34 \epsilon a \epsilon b + \epsilon b^2}\right)\right\}\right\}$$

Figura 41. Solución computacional de la ecuación (5.1) elaborado en Wolfram Mathematica

Para expresar la solución en función del índice de refracción complejo, usaremos la siguiente relación:

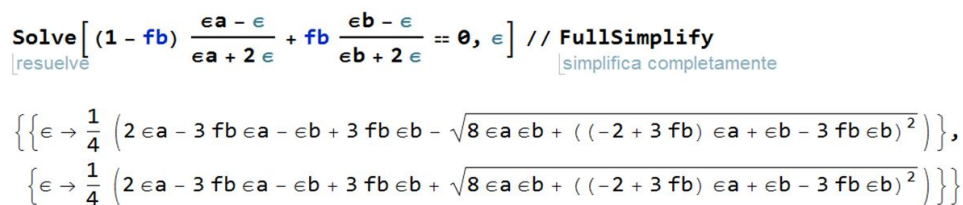
$$\varepsilon_A = N_0^2, \quad \varepsilon_B = N_2^2, \quad \varepsilon = N_1^2 \quad (5.2)$$

Entonces reemplazando (5.2) en la solución positiva de la ecuación (5.1) se obtiene:

$$N_1 = \sqrt{\frac{1}{8}(N_0^2 + N_2^2) \sqrt{N_0^4 + 34N_2^2 N_0^2 + N_2^4}} \quad (5.3)$$

Con esta ecuación se puede aproximar el índice de refracción de la capa rugosa. Por ejemplo, si una de las capas es aire ( $N_0 = 1$ ) y la otra capa tiene un índice de refracción de 5 ( $N_2 = 5$ ). Entonces, reemplazando estos valores en la ecuación (5.3) se consigue que el índice de refracción de la capa rugosa es  $N_1 = 2.83767$ .

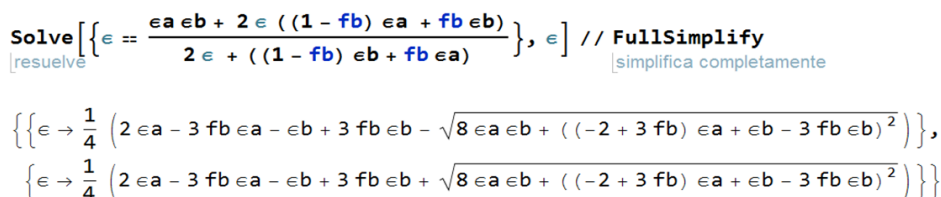
Ahora se resuelve la ecuación de EMA con fracciones volumétrica arbitrarias y en función únicamente de  $f_B$  (recordar que  $f_A + f_B = 1$ ). Esta ecuación también se resuelve computacionalmente pero de 2 maneras: con la ecuación directa (4.38) y con la ecuación general (4.50).



```
Solve[(1 - fb) * (ea - e) / (ea + 2e) + fb * (eb - e) / (eb + 2e) == 0, e] // FullSimplify
```

$$\left\{ \left\{ e \rightarrow \frac{1}{4} \left( 2ea - 3fb ea - eb + 3fb eb - \sqrt{8ea eb + ((-2 + 3fb) ea + eb - 3fb eb)^2} \right) \right\}, \right. \\ \left. \left\{ e \rightarrow \frac{1}{4} \left( 2ea - 3fb ea - eb + 3fb eb + \sqrt{8ea eb + ((-2 + 3fb) ea + eb - 3fb eb)^2} \right) \right\} \right\}$$

Figura 42. Solución computacional de la ecuación (4.38) elaborado en Wolfram Mathematica



```
Solve[{e == (ea eb + 2e((1 - fb)ea + fb eb)) / (2e + ((1 - fb)eb + fb ea))}, e] // FullSimplify
```

$$\left\{ \left\{ e \rightarrow \frac{1}{4} \left( 2ea - 3fb ea - eb + 3fb eb - \sqrt{8ea eb + ((-2 + 3fb) ea + eb - 3fb eb)^2} \right) \right\}, \right. \\ \left. \left\{ e \rightarrow \frac{1}{4} \left( 2ea - 3fb ea - eb + 3fb eb + \sqrt{8ea eb + ((-2 + 3fb) ea + eb - 3fb eb)^2} \right) \right\} \right\}$$

Figura 43. Solución computacional de la ecuación (4.50) usando Wolfram Mathematica

Así verificamos que ambos resultados son los mismos. Generalmente los resultados de EMA son comparados con el modelo Maxwell Garnett (MG). Resolviendo computacionalmente la ecuación (4.37) se obtiene:

$$\text{Solve}\left[\frac{\epsilon - \epsilon a}{\epsilon + 2 \epsilon a} == f b \frac{\epsilon b - \epsilon a}{\epsilon b + 2 \epsilon a}, \epsilon\right] // \text{FullSimplify}$$

[resuelve] [simplifica completamente]

$$\left\{ \left\{ \epsilon \rightarrow \frac{\epsilon a (-2 (-1 + f b) \epsilon a + \epsilon b + 2 f b \epsilon b)}{(2 + f b) \epsilon a + \epsilon b - f b \epsilon b} \right\} \right\}$$

Figura 44. Solución computacional de la ecuación (4.37) elaborado en Wolfram Mathematica

Se aplican los resultados de las figuras 43 y 44 en una mezcla de  $SiO_2$  ( $N_A = 1.542 - 0j$ ) y  $TiO_2$  ( $N_B = 2.2 - 0j$ ). Se grafica el índice de refracción real de la fase rugosa en función de la fracción volumétrica del  $TiO_2$  según los modelos MG y EMA.

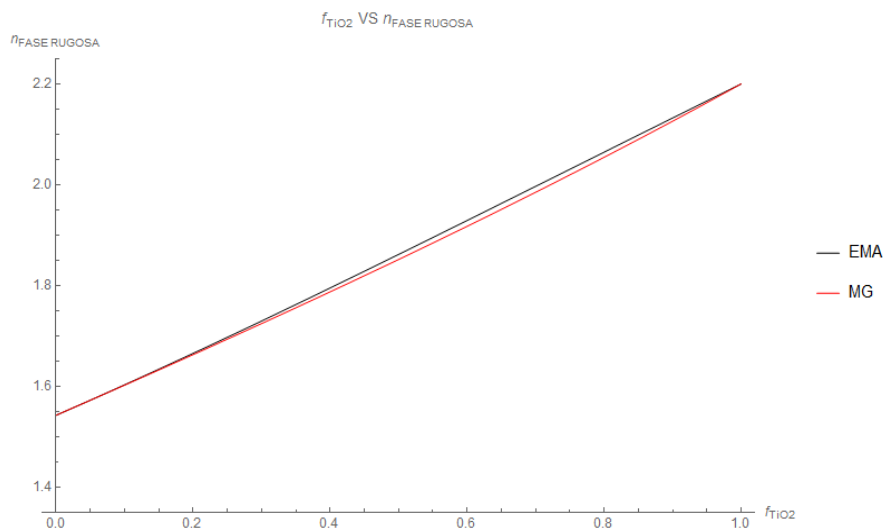


Figura 45. Gráfica del índice de refracción de la fase rugosa para una mezcla de  $SiO_2$  y  $TiO_2$  usando los modelos MG y EMA elaborado en Wolfram Mathematica

En el anterior ejemplo, se ha dejado de lado el coeficiente de extinción pues ambos índices de refracción son reales. Se propone un ejemplo con índice de refracción imaginario. En este ejemplo se mezcla aire ( $N_A = 1 - 0j$ ) con Silicio ( $N_B = 3.85 - 0.02j$ ). Se procede de manera

similar solo que ahora se toma la parte imaginaria para hallar el coeficiente de extinción del índice de refracción complejo. Se obtienen los siguientes gráficos:

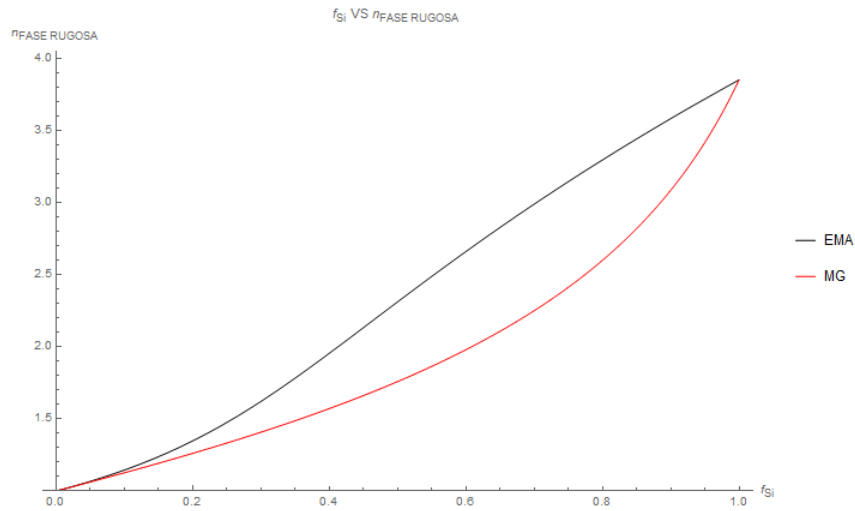


Figura 46. Gráfica del índice de refracción real de la fase rugosa para una mezcla de Aire y Silicio elaborado en

Wolfram Mathematica

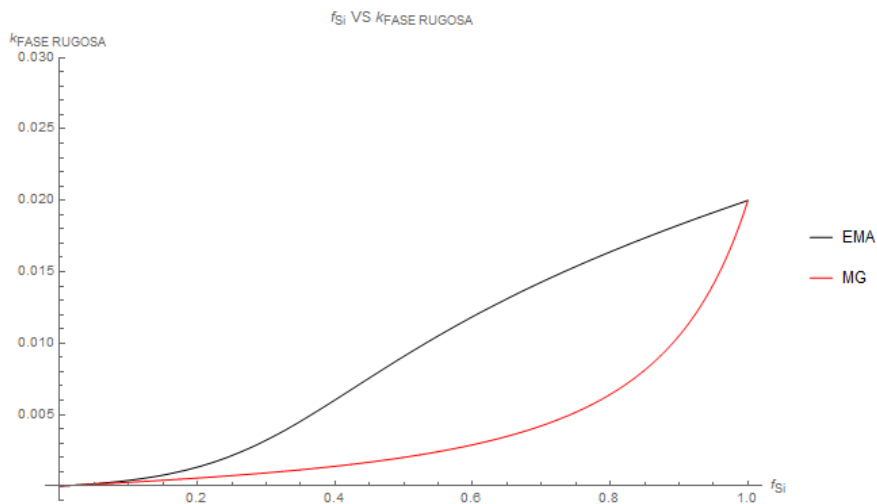


Figura 47. Gráfica del coeficiente de extinción de la fase rugosa para una mezcla de Aire y Silicio elaborado en

Wolfram Mathematica

### 5.3 Atomic Force Microscopy (AFM)

Para poder aplicar *effective medium theories* se deben satisfacer algunas condiciones:

(a) El tamaño de la fase rugosa debe ser mucho mayor que escalas atómicas ( $\sim 10^{-10}m$ )

pero menor que  $\frac{\lambda}{10}$  o  $\frac{\lambda}{20}$ .

(b) Las funciones dieléctricas de la fase rugosa deben ser independientes de su tamaño y forma

Cuando ambas condiciones son satisfechas,  $d_s$  (grosor de la capa rugosa) estimada de elipsometría muestra bastante concordancia con la rugosidad cuadrática media ( $d_{rms}$ ) caracterizada por *atomic force microscopy* (AFM) [6].

La técnica de AFM está fundamentada en el efecto túnel, una propiedad de la mecánica cuántica, y su objetivo es medir las fuerzas a nivel atómico entre la punta de la sonda afilada y la superficie de la muestra [5].

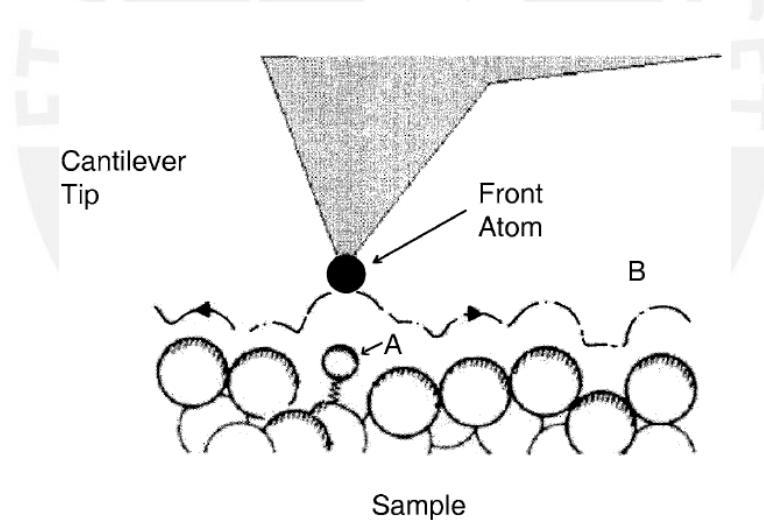


Figura 48. Mecanismo de AFM [5].

Sin embargo, los valores  $d_s$  (de elipsometría) y  $d_{rms}$  (de AFM) no son exactamente los mismos pues difieren en aproximadamente  $4 \text{ \AA}$ . Esto implica que los resultados de elipsometría incluyen los efectos de rugosidades en escala atómica, efectos que no pueden ser detectados por AFM. Aun así, esta clara relación entre elipsometría y AFM permite expresar  $d_s$  en función de  $d_{rms}$  [6].

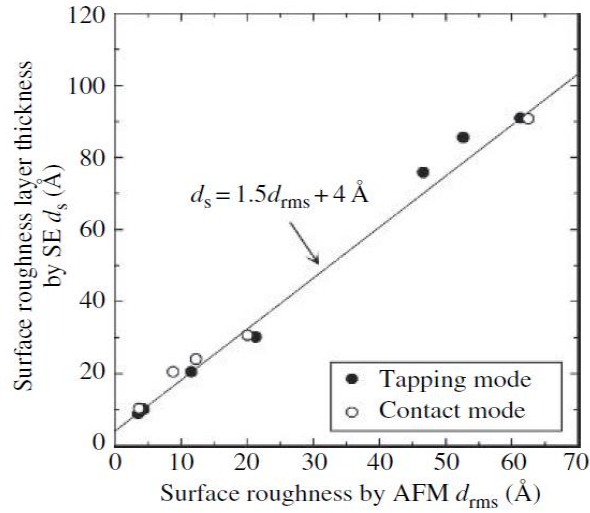


Figura 49. Gráfica  $d_s$  vs  $d_{rms}$  [6].

### 5.4 EMA-multicapas

Cuando el grosor de la superficie rugosa es mayor que  $\frac{\lambda}{10}$  es necesario aplicar un modelo complejo de *EMA-multilayers*.

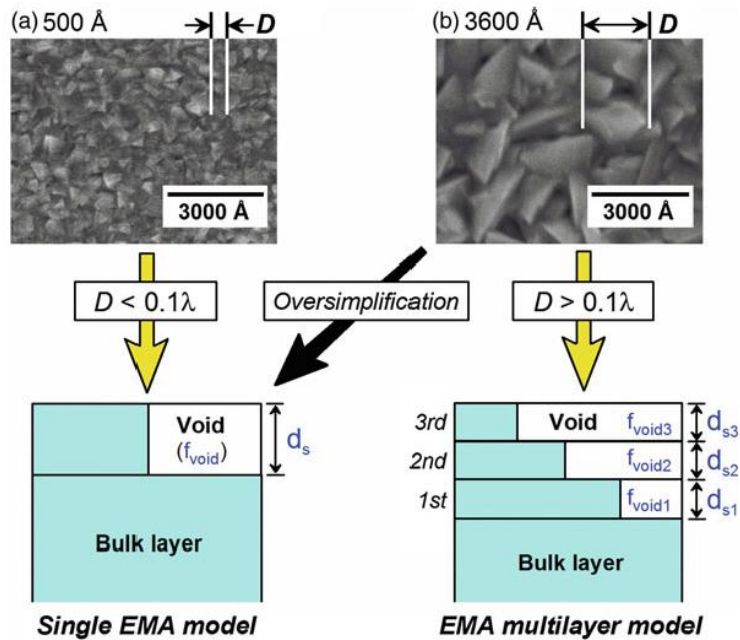


Figura 50. Modelo de EMA simple y *EMA-multilayers* [2].

El índice de refracción de cada capa será calculado con el modelo de EMA simple pero el problema es definir la fracción volumétrica en cada una de las capas. Se propone el siguiente modelo de curvatura:

$$d(r) = d_0(1 - r^\alpha) \quad (5.4)$$

Donde  $d_0$  es el grosor de la fase rugosa y  $\alpha$  es la curvatura  $d(r)$  de la sección transversal de la fase rugosa.

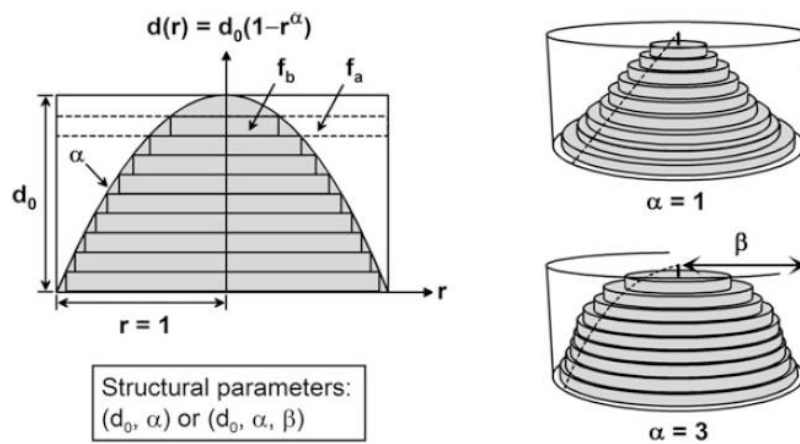


Figura 51. Modelo de curvatura para EMA-multilayers [3].

Cuando  $\alpha = 1$ , la sección transversal cambia linealmente, mientras que para  $\alpha > 1$  se crea una forma parabólica. Por lo tanto, usando este modelo, el cambio de la morfología de la superficie puede ser modelada con  $\alpha$  [3].

Si la fase rugosa se divide en  $m$  capas entonces el grosor de cada capa sería  $\frac{d_0}{m}$ . Además, es posible expresar el radio de cada capa en función de la curvatura  $d$ . La siguiente ecuación se deriva directamente de (5.4):

$$r(d) = (1 - d/d_0)^{1/\alpha} \quad (5.5)$$



Una vez descrito el modelo de curvatura, podemos hallar el volumen de cada una de las capas.

$$V(d_j) = \pi r(d_j)^2 (d_0/m) \quad (5.6)$$

Este volumen, a su vez, permite calcular las fracciones volumétricas  $f_a$  y  $f_b$  de cada capa:

$$f_a(d_j) = \frac{V(0) - V(d_j)}{V(0)} \beta \quad (5.7)$$

$$f_b(d_j) = 1 - f_a(d_j) \quad (5.8)$$

Donde  $V(0)$  es el volumen de un cilindro de radio 1 y grosor  $\frac{d_0}{m}$  y  $\beta$  es un parámetro que permite modelar con mejor precisión la variación estructural. Se debe notar que cuando  $\beta = 1$  la capa más alta tiene fracciones volumétricas  $f_a = 1$  y  $f_b = 0$  [3].

Una vez que las fracciones volumétricas  $f_a$  y  $f_b$  son conocidas, las propiedades ópticas de cada capa son obtenidas de EMA y la respuesta óptica de toda la estructura rugosa se determina considerando el efecto de interferencia convencional con multicapas [3]

## CONCLUSIONES

- Del Modelo de Drude, se puede rescatar que es un modelo bastante preciso cuando describe dieléctricos que se exponen a luz de baja frecuencia. Por el contrario, son pésimas sus predicciones cuando describe dieléctricos que se exponen a luz de alta frecuencia pues en este caso la contribución de los electrones libre es nula. Del Modelo de Drude-Lorentz, se destaca su predicción para la fase de la luz transmitida en medios transparentes, es decir, que esta tome únicamente valores de  $0^\circ$  o  $180^\circ$ .
- Mucha de las gráficas de esta monografía han sido elaboradas en base a ecuaciones que se encuentran en la literatura. Sin embargo, graficar la fase y la amplitud de la luz transmitida de la sección 2 resultó complicado pues la literatura no proporcionaba la ecuación exacta de estos parámetros. Además, había una constante a la que no se le había asignado valor. Se tuvo que manipular esta constante con ensayo y error hasta que la gráfica elaborada en Wolfram Mathematica coincidiera con la de la literatura.
- Al estudiar el tema de medios efectivos, muchas de las ecuaciones de la literatura se escribían directamente, sin mucho hincapié en su procedencia. Es por eso que en la sección 4 se detalló, en su mayoría, el paso a paso de cada una de las ecuaciones.
- El software Wolfram Mathematica ha sido útil a la hora de recrear gráficas que se encuentran en la literatura y en la resolución de ecuaciones analíticas. Se espera que el código que se ha elaborado sirva como plantilla para próximas investigaciones.
- Los modelos clásicos que se han estudiado evidencian limitaciones para su aplicación. Es por eso que para próximos trabajos se espera incluir modelos propios de la Mecánica Cuántica.

## BIBLIOGRAFÍA

- [1] Ascroft, N., Mermin D. (1976). The Drude Theory of Metals. *Solid State Physics*. (pp. 2-25). New York: Saunders College Publishing
- [2] Collins, R., Fujiwara, H. (2018). Effect of Surface Roughness on Dielectric. *Spectroscopic Ellipsometry for Photovoltaics*. (Tomo 1, pp. 155-159). Florida: Springer
- [3] Collins, R., Fujiwara, H. (2018). EMA Multilayer and Surface Area Models. *Applications and Optical Data of Solar Cell Materials*. (Tomo 2, pp. 151-153). Florida: Springer
- [4] Dresselhaus, M., Dresselhaus, G., Cronin, S., Souza, A. (2003). Drude Theory: Free Carrier Contribution to the Optical Properties. *Solid State Properties*. (pp. 329-338). Berlin: Springer
- [5] Feng, C., Khulbe, K., Matsuura, T. (2008). Atomic Force Microscopy. *Synthetic Polymeric*. (pp. 19-23). Ottawa: Springer
- [6] Fujiwara, H. (2003). Dielectric function Models. *Spectroscopic Ellipsometry*. (pp. 160-191). Ibaraki: Wiley
- [7] Gebhard, F. (2000). Metal – Insulator Transitions. *The Mott Metal - Insulator Transition*. (pp. 1-8). Ibaraki: Wiley
- [8] Harald, I., Luth, H. (2009). Electrostatic Screening in a Fermi Gas – The Mott Transition. *An Introduction to Principles of Materials Science*. (pp. 150-152). Aachen: Springer
- [9] Tompkins, H. (1993). The Effect of Roughness. *A User's Guide to Ellipsometry*. (pp. 95-99). Mesa: Academic Press