

Ecuación de transporte de Boltzmann: más allá de la ley de Ohm

D. Mendoza y E. Carvajal

*Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México
Apartado postal 70-360, 04510 México, D.F., México*

Recibido el 14 de junio de 1999; aceptado el 30 de septiembre de 1999

En el presente trabajo exploramos las desviaciones a la ley de Ohm tomando en cuenta la existencia de términos no lineales en el campo eléctrico. El problema se resuelve dentro del contexto de la ecuación de transporte de Boltzmann; en particular encontramos relaciones explícitas para la función de distribución fuera del equilibrio termodinámico como función de términos no lineales del campo eléctrico. También encontramos que la primera corrección a la ley de Ohm es un término cúbico en el campo eléctrico. Finalmente se realiza un análisis numérico para definir el intervalo de validez de la ley de Ohm en el caso particular del cobre.

Descriptores: Ecuación de transporte de Boltzmann; validez de la ley de Ohm; aproximación del tiempo de relajación; nivel de Fermi

In the present work we explore the validity of the Ohm's law within the framework of the Boltzmann's transport equation. Explicit forms for the distribution function in non thermodynamical equilibrium as a function of non-linear terms of the electric field are presented. It is also found that the first non-linear correction to the Ohm's law is a cubic term of the electric field. Numerical calculations to see the range of validity of the Ohm's law are made in the particular case of copper.

Keywords: Boltzmann's transport equation; validity of Ohm's law; relaxation time approximation; Fermi surface

PACS: 72.10.-d

1. Introducción

Uno de los aspectos de los materiales que han intrigado a los científicos desde finales del siglo pasado es la conducción eléctrica en los metales. Drude fue uno de los primeros que propuso un modelo para explicar el fenómeno de conducción eléctrica en metales, basándose en modelos clásicos conocidos en su época. Su modelo consiste en suponer que en un metal existe un gas de electrones que pueden moverse libremente dentro del material, donde la neutralidad eléctrica se logra suponiendo un conjunto de iones positivos rígidamente localizados dentro del sólido. Ante la presencia de un campo eléctrico externo, los electrones se moverán dentro del sólido sufriendo colisiones con los iones fijos (en este modelo se supone que no existen colisiones entre electrones).

En el modelo de Drude, la existencia de colisiones dentro del metal juega el papel fundamental de establecer el equilibrio termodinámico local dentro del sistema. En este contexto, un elemento fundamental dentro de la teoría de conducción eléctrica es la existencia del parámetro τ , el cual se identifica como el tiempo promedio entre colisiones. En su tiempo, la relevancia del trabajo de Drude consistió en proporcionar un modelo microscópico de la conductividad eléctrica σ , la cual está relacionada con el campo eléctrico externo \mathbf{E} y la densidad de corriente generada \mathbf{J} , de la siguiente manera (ley de Ohm):

$$\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}, \quad (1)$$

donde $\sigma = ne^2\tau/m$. En esta relación n es la densidad numérica de electrones libres, e y m son la carga y la masa del electrón libre, respectivamente.

Drude extendió su modelo para explicar resultados experimentales conocidos en su época, contenidos dentro de

la denominada ley de Wiedemann-Franz para metales. Dicha ley establece que $\kappa/\sigma T = L$, donde κ es la conductividad térmica, T la temperatura absoluta y L una constante universal (número de Lorenz). El modelo de Drude falla para dar cuenta cabal de la ley de Wiedemann-Franz, básicamente porque dentro de su aproximación se emplea un modelo clásico para la distribución de velocidades de los electrones (distribución de Maxwell-Boltzmann).

Posteriormente, con el advenimiento de la teoría moderna de la mecánica cuántica, Sommerfeld subsana el problema del modelo de Drude empleando la estadística de Fermi-Dirac (F-D). Éste es un paso trascendental, pues dentro de la estadística de F-D se incorpora el principio de exclusión de Pauli. Según dicho principio, a lo más un electrón puede ocupar un estado cuántico dentro del sistema; esto cambia drásticamente la distribución de las velocidades que pueden tener los electrones.

El modelo de Sommerfeld proporciona resultados satisfactorios para explicar el comportamiento de varias cantidades físicas asociadas a los metales, tales como la conductividad térmica y el calor específico. Con esto se resuelve el problema de la falla del modelo de Drude para explicar la ley de Wiedemann-Franz.

En la actualidad, el tratamiento para estudiar los procesos de transporte en los sólidos se basa en la ecuación de transporte de Boltzmann (ver por ejemplo, R. Kubo [1] y Ref. 2, p. 211). En el equilibrio termodinámico, la función de distribución de F-D nos proporciona la forma como se distribuyen los electrones en los diferentes estados cuánticos del sistema. Cuando el sistema sale del equilibrio termodinámico, por ejemplo al aplicar campos eléctricos, magnéticos o gradientes térmicos, la función de distribución de F-D ya no es más

la que nos proporciona la distribución electrónica dentro del material. En estos casos se usa la ecuación de transporte de Boltzmann para obtener la nueva función de distribución fuera del equilibrio termodinámico.

Aun cuando se emplean diferentes aproximaciones para resolver la ecuación de transporte de Boltzmann, la denominada aproximación del tiempo de relajación es útil para dar una explicación satisfactoria a toda una variedad de fenómenos que suceden dentro de los sólidos; tales como la ley de Ohm para la conductividad eléctrica, el efecto Hall, el efecto Seebeck, el efecto Peltier, etc. En las referencias bibliográficas proporcionadas al final de este escrito pueden verse con más detalle los diferentes fenómenos físicos mencionados anteriormente.

Cuando se trata el problema de la ley de Ohm dentro del contexto de la ecuación de transporte de Boltzmann [Ec. (1)], el procedimiento usual consiste en encontrar una forma aproximada para la función de distribución fuera del equilibrio termodinámico, que depende únicamente del campo eléctrico en forma lineal. Es decir, no se toman en cuenta términos de orden superior para el campo eléctrico. En todas las referencias consultadas por los presentes autores (ver referencias al final), no se tratan las correcciones superiores al campo eléctrico dentro del contexto de la ecuación de transporte de Boltzmann. En este trabajo exploramos el efecto de ir más allá de la ley de Ohm, es decir, se toma en cuenta la existencia de potencias superiores a uno en el campo eléctrico para calcular la densidad de corriente eléctrica. En particular, analizamos numéricamente el caso del cobre, como prototipo de un buen conductor eléctrico. Al final encontramos que para campos eléctricos típicos empleados en el laboratorio, la ley de Ohm resulta totalmente adecuada para describir el proceso de conducción eléctrica en el cobre. Pero pensamos que resulta ilustrativo el análisis de explorar efectos no lineales, que podrían ser importantes en otros sistemas.

2. Solución aproximada a la ecuación de transporte de Boltzmann

Nuestro interés es conocer las correcciones a la ley de Ohm, tomando en cuenta términos con potencias superiores a uno en el campo eléctrico. Para esto es necesario conocer primero la función de distribución fuera del equilibrio termodinámico (f), obtenida de la ecuación de transporte de Boltzmann [3]^a:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f - \frac{e}{\hbar} \mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{col} \quad (2)$$

Aquí la única fuente externa que saca del equilibrio termodinámico al sistema es el campo eléctrico \mathbf{E} . Los símbolos $\nabla_{\mathbf{r}}$ y $\nabla_{\mathbf{k}}$ representan los operadores gradiente respecto a la variable de posición \mathbf{r} y al vector de onda \mathbf{k} , respectivamente, y \hbar es la constante de Planck dividida por 2π . El término $(\partial f / \partial t)_{col}$ es de gran importancia dentro de los fundamentos de la ecuación de transporte de Boltzmann. Esto quiere decir que el papel que juegan las colisiones (de ahí el subíndice

col) de los electrones con los distintos centros dispersores dentro del sólido (vibraciones de la red o defectos estructurales, por ejemplo) determinan la dinámica de los portadores de carga. Una vez que desaparezcan los agentes externos que perturban al sistema, las colisiones internas de los portadores con los centros de dispersión serán el único mecanismo que permitirá que el sistema regrese nuevamente al equilibrio termodinámico.

Para resolver la Ec. (2) hacemos las siguientes suposiciones, que son típicas para tratar el problema de conductividad eléctrica:

- 1) $(\partial f / \partial t) = 0$; caso estacionario,
- 2) $\nabla_{\mathbf{r}} \cdot f = 0$; sistema homogéneo, la función f no depende explícitamente de las coordenadas espaciales,
- 3) por simplicidad elegimos la dirección del campo eléctrico a lo largo del eje z de coordenadas, esto es, $\mathbf{E} = (0, 0, E_z)$ con $E_z = \text{constante}$, y
- 4) $(\partial f / \partial t)_{col} = -(f - f_0) / \tau$; aproximación del tiempo de relajación τ , donde f_0 es la función de distribución de F-D en el equilibrio termodinámico. Dentro de nuestro tratamiento supondremos que τ es sólo función de la energía asociada a los electrones.

El punto (4) es una suposición que nos permite conocer de una manera simple la forma como evoluciona la función f fuera del equilibrio, al quitar repentinamente la fuente de excitación externa. Esto se puede ver de la Ec. (2) si el campo eléctrico se interrumpe al tiempo $t = 0$, donde $f(t = 0) = f_i$ y considerando un sistema homogéneo, tenemos que

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{f - f_0}{\tau}$$

lo que nos lleva a

$$f - f_0 = (f_i - f_0)e^{-t/\tau}$$

Esto quiere decir que, una vez que se haya quitado la fuente de excitación externa, la función f tenderá al equilibrio termodinámico f_0 (F-D) en un tiempo característico τ , que es el tiempo de relajación.

Tomando en cuenta las consideraciones 1-4, la Ec. (2) se reduce a:

$$f = f_0 + \frac{e\tau}{\hbar} E_z \frac{\partial f}{\partial k_z} \quad (3)$$

Estrictamente, para conocer f tendríamos que resolver la ecuación diferencial (3); pero seguiremos el procedimiento habitual aproximado del método de iteraciones. El método iterativo consiste en suponer, como primera aproximación, que f dentro de la derivada en la Ec. (3) se toma como f_0 . El siguiente paso es poner a la expresión resultante como f en la derivada y así sucesivamente. Obviamente que el orden de iteración del que uno pueda hacer uso dependerá del grado en que f se separe del equilibrio termodinámico representada por f_0 . Más específicamente, como mostraremos adelante, la validez del orden de iteración empleado dependerá de la

magnitud del campo eléctrico aplicado. De esta manera, las diferentes aproximaciones iterativas (f_i) para f son

$$\begin{aligned} f_1 &= f_0 + \frac{e\tau}{\hbar} E_z \frac{\partial f_0}{\partial k_z}, \\ f_2 &= f_0 + \frac{e\tau}{\hbar} E_z \frac{\partial f_1}{\partial k_z}, \\ f_3 &= f_0 + \frac{e\tau}{\hbar} E_z \frac{\partial f_2}{\partial k_z}. \end{aligned} \quad (4)$$

Se puede ver de las Ecs. (4) que f_1 sólo depende de E_z en forma lineal. En los textos que tratan el problema de la conducción eléctrica en metales sólo se trabaja con f_1 , esto lleva a fenómenos lineales y es como surge la ley de Ohm. También se puede ver de (4) que las siguientes aproximaciones conducen a contribuciones no lineales del campo eléctrico. En este trabajo únicamente haremos el tratamiento del problema hasta f_3 .

Para tener expresiones explícitas de las f_i en términos de la energía (ϵ) de los electrones, es necesario conocer la dependencia de ϵ como función del vector de onda \mathbf{k} ; ésto es, debemos conocer la relación de dispersión o forma de las bandas de energía para los electrones $\epsilon(\mathbf{k})$. En general, la forma de las bandas de energía puede ser muy complicada y no necesariamente tendremos una forma explícita de $\epsilon(\mathbf{k})$. La forma de las bandas de energía dependerá básicamente del tipo de potencial atómico que exista dentro del material en cuestión.

El problema más simple que se puede tratar es el gas de electrones libres, donde no existen potenciales atómicos que interfieran con el movimiento de los electrones. En esta situación, las bandas de energía están dadas por $\epsilon(\mathbf{k}) = (\hbar^2/2m)k^2$, con $k^2 = \mathbf{k} \cdot \mathbf{k}$; pero en muchos de los casos de interés (*buenos conductores eléctricos*), es posible seguir conservando la forma de bandas parabólicas. Esto se puede hacer porque en las regiones relevantes para la conducción eléctrica, las bandas de energía poseen un mínimo local alrededor del cual es posible hacer aproximaciones parabólicas. En tales situaciones es necesario introducir un parámetro importante, denominado la masa efectiva m^* , que posee información local sobre la forma de las bandas y, por tanto, toma en cuenta el efecto de la interacción de los electrones en movimiento con los potenciales atómicos del sólido. De esta manera consideramos bandas parabólicas de la forma (ver referencias sobre el estado sólido al final del manuscrito)

$$\epsilon(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2m^*} k^2, \quad (5)$$

donde la masa del electrón libre se ha sustituido por la masa efectiva m^* .

Usando la expresión (5) tenemos las siguientes relaciones:

$$\begin{aligned} \mathbf{v} &= \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \epsilon(\mathbf{k}) = \frac{\hbar}{m^*} \mathbf{k}, \\ \frac{\partial}{\partial k_z} &= \frac{\partial \epsilon}{\partial k_z} \frac{\partial}{\partial \epsilon} = \frac{\hbar^2}{m^*} k_z \frac{\partial}{\partial \epsilon} = \hbar v_z \frac{\partial}{\partial \epsilon}. \end{aligned} \quad (6)$$

De esta manera todas las derivadas serán únicamente respecto de la energía ϵ ; por lo que de aquí en adelante, para simplificar las expresiones resultantes, usaremos la notación (') para estas derivadas. Empleando las relaciones dadas en (6), no es difícil mostrar que la forma que toman las expresiones para las f_i desarrolladas a partir de (4) es la siguiente:

$$\begin{aligned} f_1 &= f_0 + (e\tau v_z f'_0) E_z, \\ f_2 &= f_0 + (e\tau v_z f'_0) E_z \\ &\quad + \left(\frac{e^2}{m^*} \tau^2 f''_0 + e^2 \tau \tau' v_z^2 f'_0 + e^2 \tau^2 v_z^2 f''_0 \right) E_z^2, \\ f_3 &= f_0 + (e\tau v_z f'_0) E_z \\ &\quad + \left(\frac{e^2}{m^*} \tau^2 f''_0 + e^2 \tau \tau' v_z^2 f'_0 + e^2 \tau^2 v_z^2 f''_0 \right) E_z^2 \\ &\quad + \left(\frac{4e^3}{m^*} \tau^2 \tau' v_z f'_0 + e^3 \tau \tau'^2 v_z^3 f'_0 + e^3 \tau^2 \tau'' v_z^3 f'_0 \right. \\ &\quad \left. + \frac{3e^3}{m^*} \tau^3 v_z f''_0 + 3e^3 \tau^2 \tau' v_z^3 f''_0 + e^3 \tau^3 v_z^3 f'''_0 \right) E_z^3. \end{aligned} \quad (7)$$

3. Evaluación de la densidad de corriente

Una vez que se tiene la forma explícita para la función f en los distintos órdenes de iteración (f_i), el siguiente paso es la evaluación de la densidad de corriente (\mathbf{J}) empleando la expresión general [2, 3].

$$\mathbf{J} = -\frac{e}{4\pi^3 \hbar} \int \left(\frac{\mathbf{v}}{v} \right) f d\epsilon dS, \quad (8)$$

donde v es la magnitud del vector velocidad \mathbf{v} y f tomará el valor de f_i dependiendo del tipo de aproximación que se desee trabajar. La evaluación de la integral (8) con dS se realiza sobre las superficies de energía constante en el espacio \mathbf{k} y con $d\epsilon$ sobre todas las posibles energías del sistema. Bajo las condiciones de nuestro planteamiento (campo eléctrico en la dirección del eje z), esperamos que el vector de densidad de corriente únicamente tendrá componente z , por lo que la integral por evaluar toma la siguiente forma:

$$J_z = -\frac{e}{4\pi^3 \hbar} \int \left(\frac{v_z}{v} \right) f d\epsilon dS. \quad (9)$$

Una simplificación importante para evaluar la integral (9) proviene del hecho de que al emplear bandas parabólicas [Ec. (5)], las superficies de energía constante corresponden a esferas en el espacio \mathbf{k} con radio $(2m^* \epsilon / \hbar^2)^{1/2}$. En este caso el empleo de coordenadas esféricas resulta idóneo para la evaluación de las integrales. Así, $dS = k^2 \sin\theta d\theta d\phi$ y $k_z = k \cos\theta$ ó equivalentemente, $v_z = v \cos\theta$; lo que implica que todas las contribuciones angulares vendrán únicamente de los términos donde aparezca v_z . Con este último hecho y tomando en cuenta el término v_z que aparece en el integrando de (9), no es difícil darse cuenta que todos aquellos términos

en las f_i que contengan potencias pares de v_z se anulan al realizar la integración sobre θ .

Por otro lado, como nuestro objetivo se centra en estudiar el efecto del campo eléctrico en la densidad de corriente, haremos a un lado la dependencia en la temperatura y trabajaremos a temperatura de cero Kelvin. Pensamos que aún con dicha suposición, los resultados obtenidos tendrán validez para un intervalo amplio de temperaturas. Esto se debe a que la dependencia con la temperatura recae en la función de distribución de Fermi-Dirac (f_0); cuya derivada respecto de la energía a temperaturas finitas corresponde a un pico pronunciado centrado alrededor del nivel de Fermi E_F . Pero a $T = 0$ K, dicha derivada es igual a una función delta de Dirac,

es decir $f'_0 = -\delta(\varepsilon - E_F)$; lo que simplifica apreciablemente la evaluación de las integrales correspondientes que aparecen en (9). De esta manera, las derivadas superiores de f_0 serán derivadas de la función delta; y aquí hacemos uso de la relación conocida expresada por

$$\int g(\varepsilon)\delta^{(n)}(\varepsilon - E_F) d\varepsilon = (-1)^n g^{(n)}(E_F),$$

donde $g(\varepsilon)$ es cualquier función continua de ε alrededor de E_F y donde el símbolo (n) indica la derivada n -ésima respecto de ε de la función correspondiente [5].

Con todos los argumentos anteriores tomados en cuenta, la evaluación de la densidad de corriente [Ec. (9)] es directa. Así tenemos, por ejemplo,

$$\begin{aligned} J_{z1} &= -\frac{e}{4\pi^3\hbar} \int \frac{v_z}{v} f_1 d\varepsilon dS = -\frac{e^2 E_z}{4\pi^3\hbar} \int \tau v \cos^2 \theta [-\delta(\varepsilon - E_F)] d\varepsilon k^2 \sin \theta d\theta d\phi \\ &= \frac{e^2 E_z}{4\pi^3\hbar} \int \tau \left(\frac{2\varepsilon}{m^*}\right)^{1/2} \cos^2 \theta [\delta(\varepsilon - E_F)] d\varepsilon \frac{2m^* \varepsilon}{\hbar^2} \sin \theta d\theta d\phi = \frac{e^2 E_z}{4\pi^3\hbar} \left(\frac{2}{m^*}\right)^{1/2} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2}\right) \tau(E_F) E_F^{3/2} (2/3) 2\pi, \end{aligned}$$

pero como $E_F = (3\pi^2 n)^{2/3} (\hbar^2/2m^*)$, donde n es el número de electrones libres por unidad de volumen [3], entonces J_{z1} toma la siguiente forma:

$$J_{z1} = \frac{e^2 \tau(E_F) n}{m^*} E_z = \sigma E_z, \quad (10)$$

donde $\sigma \equiv [e^2 \tau(E_F) n/m^*]$ es la conductividad eléctrica, cuya forma algebraica es la misma que la que obtuvo Drude; pero ahora el tiempo τ tiene que ser evaluado en el nivel de Fermi (recuérdese que estamos suponiendo que τ depende de la energía). La relación (10) nos proporciona una dependencia lineal entre la densidad de corriente y el campo eléctrico; que corresponde a la forma típica de la ley de Ohm.

Siguiendo el mismo procedimiento para obtener J_{z1} , podemos evaluar las contribuciones a la densidad de corriente tomando en cuenta ahora la forma de f_2 y f_3 definidas en las relaciones expresadas en (7). El resultado es

$$J_{z2} = \sigma E_z \quad (11)$$

y

$$J_{z3} = \sigma E_z + \sigma \frac{2e^2}{5m^*} (3E_F \tau'^2 + 3E_F \tau \tau'' + 10\tau \tau') E_z^3,$$

en estas relaciones τ y sus derivadas están evaluadas en el nivel de Fermi. Notemos de los resultados presentados en (11), que si bien f_2 [Ec. (7)] depende explícitamente del campo eléctrico al cuadrado, esta contribución se cancela al calcular las integrales. Es decir, tomar la segunda iteración para f no nos lleva más allá de la ley de Ohm, sino que tenemos que ir hasta la tercera iteración en f donde ahora además tenemos una contribución cúbica del campo eléctrico. La contribución no lineal a la densidad de corriente depende explícitamente del modelo que se tenga para la dependencia del tiempo de relajación τ con la energía. Como se puede ver del resulta-

do (11), si τ es independiente de la energía entonces, al igual que en la segunda iteración, la densidad de corriente en la tercera iteración seguirá siendo lineal con el campo eléctrico.

4. Validez de la ley de Ohm

Empleando el resultado para la tercera iteración, podemos hacer una estimación del orden de magnitud del campo eléctrico para el cual la ley de Ohm es válida. Esto lo haremos para el caso del cobre y con un modelo sencillo para $\tau(\varepsilon)$.

Si suponemos que los electrones colisionan con centros de dispersión fijos en el espacio, entonces podemos pensar que el tiempo de relajación toma una forma simple dada por $\tau = l/v$, donde l es el camino libre medio que, bajo nuestra suposición, es independiente de la energía [4, 6]. En este caso v es la velocidad del electrón y en nuestro modelo está determinada completamente por la energía cinética expresada por la relación (5); así tenemos que

$$\tau(\varepsilon) = \left(\frac{m^*}{2}\right)^{1/2} l \varepsilon^{-1/2}. \quad (12)$$

Empleando la relación entre la energía y el tiempo de relajación dada por (12) y haciendo uso del resultado para J_{z3} dado en (11), encontramos que la ley de Ohm será válida si el término cúbico en E_z es despreciable comparado con el término lineal cuando se cumple la siguiente relación:

$$|E_z| \ll \left(\frac{5m^* E_F}{4e^2 \tau^2}\right)^{1/2}. \quad (13)$$

Debemos recalcar que la relación (13) nos dará únicamente una estimación del orden de magnitud del campo eléctrico para el cual la ley de Ohm es válida, pues no estamos

considerando las contribuciones a la densidad de corriente que aparecen en las iteraciones de f superiores a tres.

Ahora podemos hacer estimaciones numéricas para el caso del cobre. Los desarrollos que nos llevaron al resultado (11) fueron hechos suponiendo $T = 0$ K, pero para fines de estimación numérica tomaremos los datos para el cobre a temperatura ambiente (ver comentarios al respecto en la Sec. 3). A $T = 295$ K, $\sigma = 5.88 \times 10^7 / \Omega\text{m}$ [7]. Por otro lado, considerando que la densidad de masa del cobre es $8.96 \times 10^3 \text{ Kg/m}^3$ y que únicamente un electrón por cada átomo contribuye a la conducción eléctrica, tenemos que $n = 8.4 \times 10^{28} / \text{m}^3$. Con estos datos podemos hacer una estimación del valor del tiempo de relajación [ver Ec. (10)] de la siguiente manera: $\tau = m\sigma / e^2 n = 2.48 \times 10^{-14} \text{ s}$, donde hemos sustituido a la masa efectiva m^* por la masa del electrón libre. Como $E_F = 1.12 \times 10^{-18} \text{ J} = 7 \text{ eV}$, [7], sustituyendo nuevamente el valor de m^* por la masa del electrón libre, llegamos finalmente a que la ley de Ohm será válida dentro de nuestra aproximación si el campo eléctrico aplicado, obtenido de (13), cumple con la condición

$$|E_z| \ll 2.8 \times 10^8 \text{ V/m.} \quad (14)$$

En condiciones normales, los campos eléctricos son mucho menores que la cota superior impuesta por la relación (14); por lo que para fines prácticos, al menos para el caso del cobre como un prototipo de buen conductor eléctrico, el uso de la ley de Ohm es completamente válido.

Sólo con fines ilustrativos, veamos cuál sería la magnitud de la densidad de corriente que se obtendría si lográramos aplicar a un cable de cobre un campo eléctrico tan grande como la cota superior impuesta por (14). La densidad de corriente, obtenida cuando los dos términos en J_{z3} [Ec. (11)] son comparables, tendrá el valor de $J_{z3} \sim 2\sigma E_z \sim 3.3 \times 10^{16} \text{ A/m}^2 = 3.3 \times 10^{12} \text{ A/cm}^2$. Éstas son densidades de corriente enormes, que un cable común de cobre no

podría soportar pues, por el efecto del calentamiento Joule, se fundiría antes de alcanzar corrientes eléctricas tan grandes. Densidades de corriente eléctrica tan altas sólo se podrían soportar con *superconductores*, materiales que idealmente tienen una conductividad eléctrica infinita. Por ejemplo [8], para películas delgadas de la cerámica superconductora $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ se ha reportado una densidad de corriente máxima de $1.3 \times 10^9 \text{ A/cm}^2$ a $T = 4$ K, que como se puede apreciar, aun con materiales superconductores, este valor es mucho menor que el obtenido con nuestra estimación para el cobre.

5. Conclusiones

En este trabajo exploramos el efecto de considerar términos no lineales en el campo eléctrico para calcular la densidad de corriente dentro del contexto de la ecuación de transporte de Boltzmann. Si bien los cálculos fueron hechos suponiendo $T = 0$ K, los resultados tienen validez para un intervalo más amplio de temperaturas. Encontramos que sólo hasta la tercera iteración de la función de distribución fuera del equilibrio es cuando la densidad de corriente tiene una contribución no lineal en el campo eléctrico. Trabajando con un modelo sencillo del tiempo de relajación como función de la energía, con centros de dispersión fijos en el espacio, se hizo una estimación de la magnitud del campo eléctrico para el cual la ley de Ohm es válida, tomando para dicho fin al cobre como un caso particular. Se encuentra que para campos eléctricos usados comúnmente en la práctica, el empleo de la ley de Ohm está completamente justificado.

Agradecimientos

E. Carvajal reconoce el apoyo financiero proporcionado por el CONACYT y la DGEP-UNAM.

^a Estrictamente hablando, en la ecuación de transporte de Boltzmann clásica, en lugar del término $-\frac{e}{\hbar} \mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f$ debe de estar $-\frac{e}{m} \mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f$, donde \mathbf{v} es el vector velocidad. Aquí es necesario aclarar que todos los desarrollos del presente trabajo pueden hacerse sin que aparezca la constante \hbar (ver referencia [13], cap. 13). Pero la idea de los autores es describir el problema de la ley de Ohm dentro del contexto del transporte de carga en sólidos, por lo que es necesario hacer alusión a las bandas de energía electrónicas, $\epsilon(\mathbf{k})$, en términos del vector de onda \mathbf{k} . Al introducir la variable \mathbf{k} , resulta imprescindible la aparición de la constante \hbar ; que en el caso simple de bandas parabólicas tratado en el presente trabajo, lleva a una relación directa con la velocidad; tal como aparece en la Ec. (6). La justificación de la forma general para la ecuación de transporte de Boltzmann presentada en la Ec. (2), sale fuera del objetivo del presente trabajo: por lo que se sugiere a los lectores interesados ver las siguientes referencias: [2], cap. 6; [3], cap. 9 y [4], cap. 12.

En las referencias marcadas con (*) se pueden ver discusiones

relacionadas con la ley de Wiedemann-Franz y los efectos termoelectricos en sólidos.

1. E.G.D. Cohen and W. Thirring, editors, *The Boltzmann Equation: Theory and Applications*. (Springer-Verlag, Wien, 1973). Ésta es una excelente referencia que presenta una perspectiva histórica de la vida y obra de Boltzmann; así como de la ecuación de transporte y sus aplicaciones a diferentes problemas físicos. En particular, R. Kubo hace una exposición de la ecuación de transporte de Boltzmann en el contexto de la física del estado sólido (p. 301) y en otro capítulo (K. Seeger y H. Potzl, p. 341) se presenta una discusión sobre las desviaciones de la ley de Ohm aplicado al caso particular de los semiconductores.
2. *J.M. Ziman, *Principles of the Theory of Solids*, 2nd edition, (Cambridge University Press, Cambridge, 1972) Cap. 7. Referencia clásica de la física del estado sólido. El tratamiento sobre las propiedades de transporte se realiza usando la ecuación de transporte de Boltzmann en el caso lineal.

3. *H. Ibach and H. Lüth, *Solid State Physics*, thirth edition, (Springer-Verlag, Berlin, 1993) Cap. 9. En el problema 9.3 se propone estudiar el efecto en la segunda iteración para encontrar una conductividad eléctrica efectiva como función del campo eléctrico; en el presente trabajo hemos demostrado que no existe ningún cambio a la ley de Ohm en la segunda iteración.
4. *N.W. Ashcroft and N.D. Mermin, *Solid State Physics* (Holt-Saunders International Editions, London, 1975). Aquí únicamente se trabaja el problema lineal. En el capítulo 16 se puede encontrar una discusión completa acerca de modelos de dispersión más allá que la aproximación del tiempo de relajación.
5. F.E. Prieto, J.M. Lozano y M. Bauer, *Métodos Matemáticos de la Física: Funciones Especiales*, primera edición, (Manuales Universitarios UNAM, México, 1969).
6. *J.P. McKelvey, *Solid State Physics for Engineering and Materials Science*, (Krieger Publishing Company, Florida, 1993). En este texto se encuentra una buena discusión acerca de la ley de Wiedemann-Franz, así como de los diferentes fenómenos termo eléctricos en sólidos; el tratamiento está hecho bajo el contexto de la ecuación de transporte de Boltzmann en el caso lineal. Al final del capítulo 7 se proponen problemas a resolver con diferentes modelos para $\tau(\epsilon)$.
7. *C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, sixth edition, (John Wiley & Sons, New York, 1986). En el apéndice F trata el problema de la ecuación de transporte de Boltzmann, no va más allá de la aproximación lineal.
8. C.P. Poole, H.A. Farach, and R.J. Creswick, *Superconductivity*, (Academic Press, San Diego, 1995) p. 392.
9. W.A. Harrison, *Solid State Theory*, (Dover Publications Inc., New York, 1979) Cap. 3. En el problema 3.4 se propone estudiar el efecto de las diferentes iteraciones de la función de distribución con contribuciones del campo eléctrico con potencias de 1 a 3. Piden demostrar que, dentro del contexto de la ecuación de transporte de Boltzmann, únicamente el término lineal en el campo eléctrico contribuye a la densidad de corriente. Como resultado del presente trabajo (sección 3), vemos que la aseveración anterior únicamente será válida si el tiempo de relajación τ se considera como independiente de la energía.
10. *J.P. McKelvey, *Física del Estado Sólido y de Semiconductores*, (Limusa, México, 1980). Este texto se puede considerar como una primera versión de la Ref. 6. En el problema 7.3 se pide de alguna forma dar un criterio para la magnitud del campo eléctrico para el cual la ley de Ohm es válida dentro del contexto de la ecuación de transporte de Boltzmann. Como podemos apreciar del desarrollo del presente trabajo, la solución a dicho problema de ninguna manera se puede considerar como trivial. Curiosamente, en la versión actualizada de este texto, Ref. 6, ya no aparece dicho problema.
11. R.E. Peierls, *Quantum Theory of Solids*, (Clarendon Press, Oxford, 1955) Cap. VI. Se trata el problema de la conductividad eléctrica empleando la ecuación de transporte de Boltzmann en el caso lineal. Se analiza el efecto en la conductividad eléctrica tomando en cuenta distintos casos de centros dispersores.
12. *N.F. Mott and H. Jones, *The Theory of the Properties of Metals and Alloys*, (Dover publications, New York, 1958) Cap. VII. En este capítulo se hace un tratamiento sobre el cálculo del tiempo de relajación, basándose en el conocimiento de la probabilidad de que un electrón sufra una colisión con los centros de dispersión. Se presenta una interesante discusión sobre la resistencia eléctrica en metales y aleaciones.
13. F. Reif, *Fundamentos de Física Estadística y Térmica*, (McGraw-Hill, Madrid, 1968) Cap. 13. En este capítulo se presenta una excelente exposición acerca de la ecuación de transporte de Boltzmann, así como métodos alternativos para resolver dicha ecuación y su aplicación a diferentes problemas físicos.
14. C. Cercignani, "The Boltzmann Equation and its Applications", *Applied Mathematical Sciences*, (Springer-Verlag, New York, 1998) Vol. 67. Se presenta un tratamiento formal sobre la ecuación de transporte de Boltzmann y conceptos relacionados.
15. *R.B. Lindsay, *Introduction to Physical Statistical*, (John Wiley & Sons, New York, 1941) Cap X. El tratamiento de la conductividad eléctrica se realiza en el caso lineal.
16. G.H. Wannier, *Statistical Physics*, (John Wiley & Sons, New York, 1966) Cap 20. Trata la ley de Ohm empleando la ecuación de transporte de Boltzmann en el caso lineal.
17. *E.M. Lifshitz and L.P. Pitaevski, "Physical Kinetics", *Course of Theoretical Physics*, Vol. 10, (Pergamon Press, Orford, 1981) Cap. IX. Presenta un tratamiento completo sobre las propiedades de transporte en metales; únicamente trabaja el caso lineal en el campo eléctrico.