

O Modelo de Drude para Interação com Metais

Bernardo Corrêa Amorim
Instituto de Física de São Carlos - USP

(Dated: June 6, 2018)

Este trabalho é dedicado a disciplina de “Eletromagnetismo A (SFI5708)” com o intuito de discurrir e apresentar em formato de monografia sobre um modelo simples e útil para descrever a teoria de condução em metais de forma geral, o modelo de Drude.

I. INTRODUÇÃO

Antes de começarmos de fato a discutir sobre o modelo, se faz necessário uma explanação do contexto em que Drude estava imerso.

Em 1897, Sir Joseph John Thomson (J.J. Thomson) descobriu que raios catódicos eram compostos de partículas as quais possuíam cargas negativas, o que antes não era conhecido. Thomson mostrou por meio de cálculos que o tamanho dessas partículas deveriam ser muito menor em relação a um átomo de Hidrogênio (cerca de 1000 vezes menor) [1].

Alguns anos a frente (1900) a comunidade científica enfrentava (ainda sem saber) o início de uma nova fase na história da física, o desenvolvimento da teoria quântica. Assim, ainda não se tinha a completa propriedade em suposições/teorias utilizando como base esse novo artifício. Em paralelo a esta linha de pesquisa, o estudo do estado sólido da matéria e a busca por explicações dos fenômenos em materiais, se mostrava promissor.

O físico alemão Paul Drude propôs, com os recursos e conhecimentos de sua época, uma construção teórica para estudar a condução elétrica e térmica dos metais [2]. Neste trabalho, será abordado apenas a parte que interessa ao curso de Eletromagnetismo A.

II. O MODELO DE DRUDE

Na passagem do século XIX para XX, Drude considerou que quando há átomos unidos formando um material metálico, os elétrons da última camada se desprendem e se tornam livres, enquanto os íons permanecem fixos (imóveis). A teoria consistiu em supor um gás de elétrons e utilizar conceitos provenientes da teoria cinética dos gases afim de simplificar o modelo. Aqui, os elétrons são com esferas rígidas, e idênticas, as quais se movem entre os íons e eventualmente se chocam com eles. Aos elétrons livres citados a pouco dá-se o nome de elétrons de condução. É possível ter uma melhor noção esquemática dessas considerações na figura 1.

Vamos considerar um átomo com o número atômico Z_a (i.e. Z_a prótons e elétrons) em que possui uma quantidade Z de elétrons na camada de valência. Quando o íon está formado, existe um núcleo onde a carga elétrica é $+eZ_a$ envolto de uma nuvem dos elétrons mais internos (aqueles que não se desprendem), carga $-e(Z_a - Z)$, onde

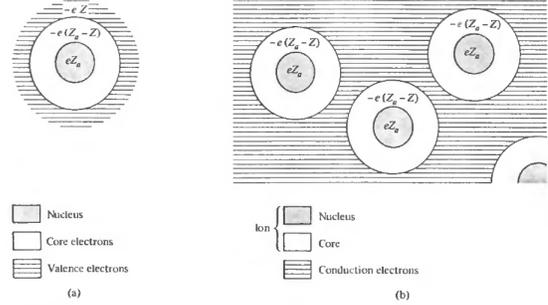


FIG. 1. (a) Átomo isolado. (b) Esquema de uma configuração em um metal genérico.^a

^a Neil Ashcroft; David Mermin (1976). *Solid State Physics*. Saunders College. pp. 67.

$e \approx 1,60 \times 10^{-19} C$ é o seu valor fundamental.

É possível ainda calcular a densidade de elétrons (n - número de elétrons por unidade de volume) presente nos metais da seguinte maneira:

$$n = N/V = \frac{N_a Z \rho_m}{A}. \quad (1)$$

Onde N_a é o número de Avogadro, A é a massa atômica e ρ_m é a densidade de massa do metal. Por exemplo, o Cobre ($1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1 3d^{10} \Rightarrow Z = 1$), material utilizado com bastante frequência no dia a dia para condução de elétrons, possui densidade $\rho_m = 8,96 g/cm^3$ e $A = 63.546 g/mol$, então:

$$n_{Cu} = 8,47 \times 10^{22} \text{ elétrons/cm}^3. \quad (2)$$

A. Considerações Principais

Para que seu modelo fosse consistente e em concordância com a física até então desenvolvida, Drude fez algumas suposições básicas, que são:

1. Aproximação de Elétron Livre e Independente

Desconsidera-se, em se tratar de eletromagnetismo, as interações entre elétron-elétron e elétron-íon. Drude considerou que na ausência de campos externos, os elétrons se moviam de forma uniforme e retilínea, ou melhor, de

maneira **independente** de outros elétrons. Mesmo na aplicação de campos, a teoria foi contruída de tal forma a impor que os entes móveis obedecem a segunda lei de Newton com o acoplamento de campos externos (eletromagnéticos), i.e. desprezando os campos gerados por elétrons e íons.

2. Colisões Instantâneas

No modelo de Drude, as interações mecânicas entre elétrons e íons são consideradas instantâneas, assim como na Teoria Cinética dos Gases. Como estamos considerando um “gás de elétrons”, cada partícula individual é uma esfera dura que muda de velocidade abruptamente ao se chocar com os entes fixos (íons).

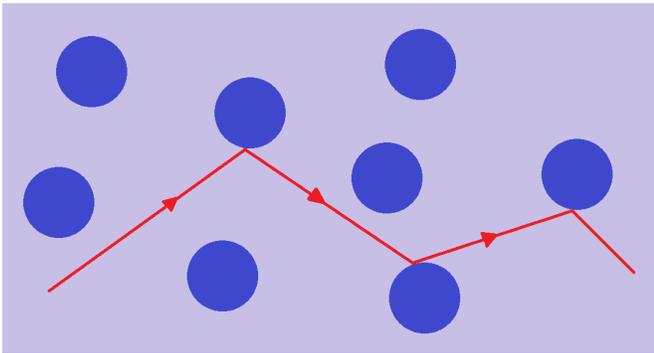


FIG. 2. Trajetória de um elétron de condução espalhado pela colisão entre os íons de acordo com Drude.

A figura 2 demonstra de maneira bem rudimentar e simples a ideia de Drude. Apesar de se saber que a imagem está incorreta (por conta do choque entre elétrons), ao se tratar de uma análise qualitativa, podemos considerar que existe um certo procedimento de espalhamento, sem que isso seja um empecilho para o que ocorre na realidade, ser comprometido.

3. Tempo de Relaxação (τ)

Como já mencionado, Drude utilizou ideias da Teoria Cinética dos Gases e retratou as colisões entre elétrons e íons de forma probabilística. Ele postulou a existência de um “tempo de relaxação”, definido como o tempo médio entre uma colisão e outra. Cada colisão sucessiva possui uma probabilidade $1/\tau$ de ocorrer, em outras palavras para cada intervalo de tempo infinitesimal dt , a probabilidade de um elétron sofrer uma colisão é dt/τ .

B. Aplicações

P. Drude estava motivado a estudar o comportamento dos metais em resposta a campos externos aplicado nesses

materiais (e.g. campos elétricos). Desta forma, é possível fazer um estudo da condutividade.

1. Condutividade Elétrica DC de um Metal

Em eletromagnetismo básico, comumente nos é apresentado a lei de Ohm por sua forma mais simples: $U = RI$, onde essa equação nos fornece a informação que a corrente elétrica I se relaciona com uma queda de potencial U por meio de um parâmetro que depende das dimensões do material, a resistência R . Além do formato, cada material possui uma constante intrínseca a qual nomeamos de **resistividade** (ρ), que definida como:

$$\vec{E} = \rho \vec{J}. \quad (3)$$

Onde \vec{J} é o vetor da densidade de corrente. Se supormos que n elétrons/ cm^3 se movem todos com uma velocidade resultante $\vec{v} = \sum_i^N \vec{v}_i$, todos, obviamente, com carga $-e$, podemos definir a densidade de corrente da seguinte maneira:

$$\vec{J} = -ne\vec{v} = -\frac{ne}{m_e} \vec{p}. \quad (4)$$

Especulando que cada elétron se movimentava (sem aplicação de campos externos) com uma velocidade (\vec{v}_i) com intensidade e direção distintas, na média elas tendem a se cancelar de forma que a velocidade resultante seja nula. Assim, densidades de corrente líquidas são inexistentes (como era de se esperar).

Dadas essas informações, podemos mostrar a importância do tempo de relaxação τ para obter um resultado que se meça na prática. Vamos supor primeiro um exemplo simples em que esse tempo não é levado em consideração. Imagine que um campo elétrico \vec{E} (constante) seja aplicado em um pedaço de metal, digamos o Cobre. Então, deve-se resolver a seguinte equação para os elétrons:

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = -e\vec{E}. \quad (5)$$

E tem como resultado (para cada componente, i.e. $i = x, y, z$ e partindo do repouso):

$$p_i(t) = -eE_i t. \quad (6)$$

Finalmente, utilizando a definição (4):

$$J_i(t) = \left(\frac{ne^2 E_i}{m_e} \right) t. \quad (7)$$

O resultado acima, claramente, não é algo físico, uma vez que na prática a corrente não cresce indefinidamente quando $t \rightarrow \infty$. O que de fato se observa é o estabelecimento de uma corrente estacionária. Drude resolveu essa questão postulando que as colisões entre elétrons e íons no material poderiam ser resolvidas com um tempo

de relaxação. Ele então, de maneira fenomenológica [3], introduziu o termo $-\vec{p}/\tau$ na equação (5):

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = -\frac{\vec{p}}{\tau} - e\vec{E}. \quad (8)$$

A solução dessa equação (já escrevendo para a densidade de corrente), utilizando as mesmas condições iniciais, para cada componente é:

$$J_i(t) = \frac{ne^2\tau}{m_e}(1 - e^{-t/\tau})E_i. \quad (9)$$

Agora sim, esta solução está de acordo com o que se mede em um experimento simples. Para tempos muito maiores que τ (e já vamos ver que esse tempo é bem curto) a relação se torna constante (estacionária):

$$\vec{J} = \frac{ne^2\tau}{m_e}\vec{E} \quad (10)$$

Note que, comparando com (3), o conjunto de constantes da equação acima é o valor do inverso da resistividade, que vamos definir como a **condutividade** (σ):

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m_e} \equiv \sigma_0. \quad (11)$$

Como já mencionado, a resistividade (logo a condutividade) é propriedade do material a ser estudado. Portanto, é possível calcular o tempo de relaxação de materiais diversos:

$$\tau = \frac{m_e}{ne^2\rho} \quad (12)$$

Repare que este resultado, assim como o valor da resistividade/condutividade, independe da intensidade do campo elétrico aplicado, isso nos remete ao fato, fazendo uma analogia, que a resistência de um material não depende do valor da corrente aplicada.

Elemento	ρ ($10^{-9}\Omega\cdot\text{cm}$)	τ ($10^{-14}s$)
Li	12,4	0,61
Cu	2,24	1,9
Ag	2,13	2,8
Au	2,84	2,1

TABLE I. Os valores dessa tabela se referem a temperatura ambiente ($T = 373K$).

Na tabela IIB 1 é possível examinar alguns resultados para os tempos de relaxação de Drude [4]. Repare que, como já adiantado, os valores de τ são muito pequenos. Assim, tempos como $t = 10^{-6}s$, por exemplo, já é um valor muito maior que qualquer resultado de τ apresentado aqui. Logo, o termo exponencial da equação (9) decai rapidamente, tornando a relação entre \vec{J} e \vec{E} , linear.

Por fim, podemos generalizar a equação de espalhamento do elétron em meio a rede para uma força \vec{F} arbitrária. De modo que (8) se torne:

$$\frac{d\vec{p}(t)}{dt} = -\frac{\vec{p}(t)}{\tau} + \vec{F}(t). \quad (13)$$

E então podemos aplicar este resultado em alguns casos de interesse.

2. Condutividade Elétrica AC de um Metal

Considere agora que o campo elétrico aplicado se comporte de forma estacionária, da seguinte maneira:

$$\vec{E}(t) = \text{Re}(\vec{E}(\omega)e^{-i\omega t}) \quad (14)$$

A equação que precisamos resolver é dada ainda por (8), entretanto, buscamos soluções estáveis da forma mais intuitiva possível, então tome o *ansatz*:

$$\vec{p}(t) = \text{Re}(\vec{p}(\omega)e^{-i\omega t}) \quad (15)$$

Substituindo (15) e (14), tanto a parte complexa quanto a parte real, em (8) obteremos o seguinte resultado:

$$(-i\omega)\vec{p}(\omega) = -\frac{1}{\tau}\vec{p}(\omega) - e\vec{E}(\omega), \quad (16)$$

$$\vec{p}(\omega) = -\left(\frac{e\tau}{1 - i\omega\tau}\right)\vec{E}(\omega). \quad (17)$$

Da mesma maneira que para o momento linear, podemos supor uma solução do mesmo tipo para a densidade de corrente. Logo, fazendo as substituições já realizadas anteriormente:

$$\vec{J}(\omega) = \frac{(ne^2\tau/m_e)}{1 - i\omega\tau}\vec{E}(\omega) = \frac{\sigma_0}{1 - i\omega\tau}\vec{E}(\omega), \quad (18)$$

$$\sigma(\omega) = \frac{\sigma_0}{1 - i\omega\tau} \quad (19)$$

Repare que podemos separar o sigma dependente da frequência de oscilação em uma parte real e uma imaginária: $\sigma(\omega) = \sigma_R(\omega) + i\sigma_I(\omega)$. Onde:

$$\sigma_R(\omega) = \frac{\sigma_0}{1 + \omega^2\tau^2} \quad (20)$$

$$\sigma_I(\omega) = \frac{\sigma_0\omega\tau}{1 + \omega^2\tau^2} \quad (21)$$

Note que podemos analisar esses resultados para casos limites e de extrema importância.

Por exemplo, quando a frequência de oscilação é diminuída, lentamente, até se anular (i.e. $\omega \rightarrow 0$). repare que para esse caso o parâmetro $\sigma_I(0)$ se anula, enquanto $\sigma_R(0) \rightarrow \sigma_0$. Logo, recupera-se o caso da condutividade DC.

Já quando assumimos o regime de frequências altas (i.e. $\omega \gg 1$), o parâmetro σ_I se torna muita mais relevante para o valor total da condutividade do que σ_R , o efeito líquido disso é que $\sigma(\omega \gg 1) \approx i\sigma_I(\omega \gg 1)$. Então o que se atesta é uma defasagem de $\pi/2$ na resposta da medição.

3. Efeito Hall e Magnetoresistência

Aqui explicaremos o efeito Hall clássico (1879) de maneira sintetizada, afinal esse não é o tema deste trabalho.

Tome um fragmento de metal retangular (por didaticidade) orientado como na figura 3. Na direção z , aplica-se um campo magnético constante, $\vec{H} = (0, 0, H)$. Ao mesmo tempo, na direção x , um campo elétrico $\vec{E} = (E_x, 0, 0)$, também constante, gera um fluxo de elétrons pela área do fragmento, J_x . O que ocorre é, a força de Lorentz, $\vec{F}_L = -(e/c)\vec{v} \times \vec{H}$, age nas partículas carregadas, desviando-as perpendicularmente (direção y). Como o fragmento é limitado, cargas negativas se acumulam em uma das bordas e então surge um campo elétrico em y , geralmente chamado de campo Hall (**efeito Hall**).

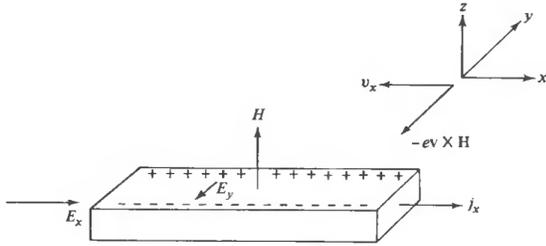


FIG. 3. Esquema simbólico do experimento efeito Hall. ^a

^a Neil Ashcroft; David Mermin (1976). Solid State Physics. Saunders College. pp. 67.

Quando o equilíbrio se estabelece na direção y , a corrente em x continua a fluir, porém, ocorre um aumento na resistência do fragmento. A esse outro fenômeno, nomeamos de **magnetoresistência**. E definimos, para meios quantitativos como:

$$\rho(H) = \frac{E_x}{J_x}. \quad (22)$$

Outra grandeza que se define é o coeficiente Hall:

$$R_H = \frac{E_y}{J_x H}. \quad (23)$$

A utilidade dessa constante tem um grande peso, pois é ela quem indica são os portadores de carga, a julgar pelo sinal de R_H . Por exemplo, se os portadores possuem cargas negativas, o campo Hall possui direção oposta ao eixo de coordenadas (assim como na figura 3), logo $R_H < 0$. No entanto, em alguns metais, é possível medir um valor positivo desse coeficiente, indicando a existência de portadores com cargas positivas. Vamos verificar se o modelo de Drude reproduz esse resultado. Consire a seguinte equação de movimento, onde a força que atua em cada elétron é $\vec{F} = -e[\vec{E} + (1/m_e c)\vec{p} \times \vec{H}]$:

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = -\frac{\vec{p}}{\tau} - e\vec{E} - \frac{e}{m_e c}\vec{p} \times \vec{H}. \quad (24)$$

Escrevendo de forma mais conveniente em termos das densidades de correntes:

$$\frac{d\vec{J}}{dt} + \frac{\vec{J} - \sigma_0 \vec{E}}{\tau} - \frac{e}{m_e c}\vec{H} \times \vec{J} = 0. \quad (25)$$

Sabe-se que:

$$\vec{J} = (J_x, -J_y, 0), \quad (26)$$

$$\vec{E} = (E_x, -E_y, 0), \quad (27)$$

$$\vec{H} = (0, 0, H). \quad (28)$$

Antes de apresentar os resultados, uma última observação. Como, após o equilíbrio das forças, a densidade de corrente em x independe do tempo então a derivada é nula. E mais a densidade de corrente em y se torna nula, mas vamos tomar essa condição apenas no fim.

As soluções então para a direção x e y , respectivamente são:

$$\sigma_0 E_x = \frac{eH}{m_e c} \tau J_y + J_x, \quad (29)$$

$$\sigma_0 E_y = -\frac{eH}{m_e c} \tau J_x + J_y. \quad (30)$$

Tomando $J_y = 0$ e rearranjando os termos em (30) e (29):

$$\frac{E_y}{J_x H} = -\frac{e\tau}{m_e \sigma_0 c} = -\frac{1}{nec}, \quad (31)$$

$$\frac{E_x}{J_x} = \frac{1}{\sigma_0}. \quad (32)$$

Portanto:

$$R_H = -\frac{1}{nec}, \quad (33)$$

$$\rho(H) = \frac{1}{\sigma_0}. \quad (34)$$

III. CONCLUSÕES

Durante o decorrer deste trabalho ficou claro que o modelo de Drude parte de suposições simples para descrever a condução de elétrons em um metal. A pergunta que ainda sobra é: quais são as consequências dessas escolhas? Os resultados são satisfatórios? Essa resposta pode ser respondida em partes.

Para o cálculo de condutividade, o modelo que Drude construiu descreve bem aquilo que se pode medir, uma boa forma de comprovar isso é estimando o livre caminho médio $l = \bar{v}\tau$. O parâmetro \bar{v} é a velocidade média dos elétrons, e pode ser estimada através da equipartição clássica de energia $m\bar{v}^2/2 = 3k_B T/2$. Para a temperatura ambiente ($T = 373K$), \bar{v} é da ordem de 10^7 cm/s, uma vez que $\tau \sim 10^{-15} - 10^{-14}$ s, então $l \sim 1 - 10$ Å. Esse resultado está demasiado coerente, pois a suposição de Drude se referia a distâncias interatômicas (entre os íons). O problema é que a estimativa de \bar{v} é um cálculo clássico, todavia, hoje sabemos que isso

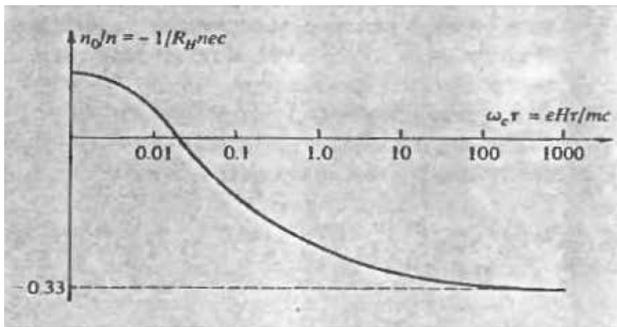


FIG. 4. Variação do número $-1/R_H n c$ em função de $eH\tau/m_e c$, para o Alumínio (Al).^a

^a De Luck, R. (1966) “Zur Temperatur und Feldabhängigkeit der galvanomagnetischen Eigenschaften von Aluminium und Indium”

se trata de um problema quântico e \bar{v} possui um valor maior do que o calculado aqui. Esse aumento na estimativa pode alterar o livre caminho médio até mil vezes [4], assim as distâncias entre os íons seria muito maior do que realmente é. Felizmente, experimentos realizados a baixas temperaturas conseguem reproduzir os resultados que esse modelo (clássico) prevê.

Já para o outro caso, o cálculo do coeficiente Hall e da magnetorresistência, o modelo apresenta falhas mais diretas. Através da ideia de Drude, pudemos chegar em um resultado o qual o físico E. H. Hall (1879) havia descoberto em suas experiências, a resistência dos metais

não dependem do campo magnético aplicado. Atualmente, sabe-se que, em experimentos mais sofisticados, existe essa dependência e ela só pode ser prevista com uma teoria quântica em sólidos. Recurso esse o qual era inexistente, ou começara a nascer.

O resultado para o coeficiente Hall nos fornece a informação de que esse parâmetro é sempre negativo e não possui dependência do campo magnético. Na verdade, para muitos materiais o modelo descreve corretamente (e.g. Li, Cu). Aconte que alguns metais como Berílio (Be) e o Alumínio (Al) possuem esse coeficiente positivo [3]. Esse erro se dá justamente por conta da não dependência do campo magnético, na realidade essa ligação existe. O gráfico na figura 4 nos mostra a afirmação acima para o caso do Alumínio [5].

Finalmente, para concluir, é evidente que alguns resultados do modelo de Drude não são satisfatórios se formos rigorosos na busca de um modelo que descreve completamente o objeto de estudo do ponto de vista microscópico. Entretanto, Drude em 1900 conseguiu criar um modelo que para uma abordagem simples, é suficiente.

O pioneiro a se esforçar em resolver as questões inexplicadas por meio do modelo de Drude, foi Sommerfeld. Não entraremos em detalhes, mas a primeira correção na teoria foi levar em conta o princípio de exclusão de Pauli (resultado da teoria quântica) e alterar o tipo de estatística que o gás de elétrons obedecia. E então, construir um modelo do início levando em conta a Mecânica Quântica.

[1] Falconer (2001) “Corpuscles to electrons”.
 [2] Drude, Paul (1900). “Zur Elektronentheorie der Metalle”. *Annalen der Physik*. 306 (3): 566.
 [3] Oliveira, Ivan S.; de Jesus, Vitor L.B. (2005), *Introdução à Física do Estado Sólido*. Livraria da Física.

[4] Neil Ashcroft; David Mermin (1976). *Solid State Physics*. Saunders College. pp. 67.
 [5] De Luck, R. (1966) “Zur Temperatur und Feldabhängigkeit der galvanomagnetischen Eigenschaften von Aluminium und Indium” p.49.