F9 Mån LV4

Elektrongas av ledningselektroner

Frielektronmodellen: $\psi_{\bar{k}}(\bar{r}) \sim \exp(i\bar{k}\bar{r})$

med energi $\varepsilon_{\bar{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ $\quad k = |\bar{k}|$

Fermivågtalet: $k_F = (3\pi^2 n)^{\frac{1}{3}}$ $\quad$ n - elektrontäthet

Fermienergin ($\mu(T=0)$): $\varepsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$

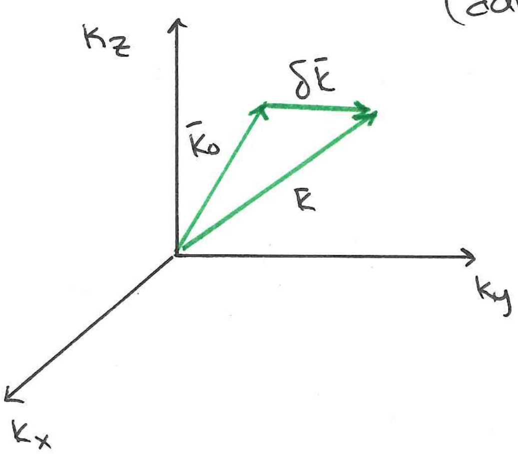
Konduktivitet

Kraft $\bar{F} = -e\bar{E}$ på varje elektron!

$\bar{F} = \frac{d\bar{p}}{dt} \Leftrightarrow \hbar \frac{d\bar{k}}{dt} = \bar{F}$

Obs! Vi fokuserar på ändringen i vågtalet, $\underbrace{\delta\bar{k}}_{\bar{k} = \bar{k}_0 + \delta\bar{k}}$

(där k_0 är vågtalet vid jämvikt utan kraft!)



om vi stänger av kraften så återgår elektronen till vågtal $\bar{k}_0$ över tidsskala τ

$\left\{\begin{array}{l}\text{relaxionstid} \\ \text{kollisionstid}\end{array}\right.$

$$\hbar \frac{d\delta \bar{k}}{dt} = -\hbar \frac{\delta \bar{k}}{\tau} - e\bar{E}$$

Var kommer τ ifrån??

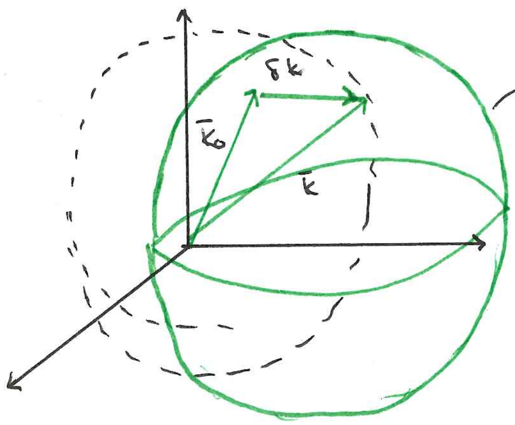
- ~~elektronkollisioner med~~ fononer!
- oregelbundheter i gittret (en verklig kristall är ej perfekt!)
- elektron-elektron kollisioner

Intresserad av stationärt flöde nu!

stationärt flöde: $\frac{d\delta \bar{k}}{dt} = 0$

$$\Rightarrow \delta \bar{k} = \frac{-1}{\hbar} \tau e \bar{E}$$

stationär förskjutning av vågtalet för alla elektroner



Förskjutning av Fermisfären!

- nettoflöde av elektroner

drifthastighet:

$$\bar{V}_{drift} = \frac{\delta \bar{p}}{m} = \hbar \frac{\delta \bar{k}}{m} = \frac{-e\tau}{m} \bar{E}$$

Samma som för Drudemodellen!

Ohm's lag $\bar{j} = \sigma \bar{E}$ där $\vec{j} = -n e \bar{v}_{drift}$

elektrontäthet

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m} \quad \text{konduktivitet}$$

$$\rho = \frac{m}{ne^2\tau} \quad \text{resistivitet}$$

Obs! $\bar{v}_{drift}$ är ej den verkliga hastigheten! för en elektron

verklig hastighet: $\bar{v} = \hbar \frac{\bar{k}}{m}$

Ta $k = k_F \sim$ några $Å^{-1}$ för metall

$\rightarrow \frac{v}{c} = \frac{\hbar c}{mc^2} k_F \approx 10^{-3} \rightarrow v \cong 10^5 \frac{m}{s}$

ljusets hastighet

Elektroner i periodisk potential (kap 7)

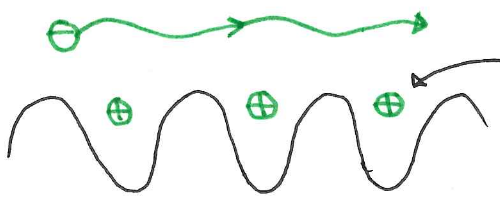
Frielektronmodellen (ger beskrivning av en ~~modell~~ metall!)

" Frielektronmodell $\rightarrow$ metall, $\bar{E}$-fält $\rightarrow$ ström! "

om isolator: $\bar{E}$-ström $\not\rightarrow$ ström $\{\sigma = 0 \text{ (vid } T=0)\}$

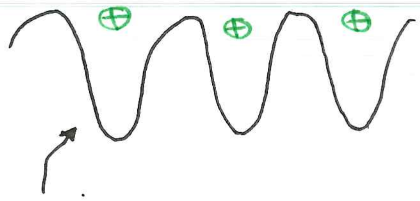
dvs frielektronmodellen kan ei beskriva en isolator !!

Vi behöver periodisk potential!



joner i kristallen

potential $U(\bar{r})$ periodisk!



lägre energi nära joner

dvs $U(\bar{r}+\bar{T}) = U(\bar{r})$

$$\left(\bar{T} = m\bar{a}_1 + n\bar{a}_2 + p\bar{a}_3\right)$$

(gittervektor)

F-utveckla: $U(\bar{r}) = \sum_{\bar{q}} U_{\bar{q}} \exp(i\bar{q}\bar{r})$

om $U(\bar{r}+T) = U(\bar{r}) \Rightarrow \exp(i\bar{q}\bar{r}) = 1$

$\Rightarrow$ dvs $\bar{q}T = 2\pi \cdot$(heltal)

q är en reciprok gittervektor $G_{hkl} = h\bar{b}_1 + k\bar{b}_2 + l\bar{b}_3$

$$U(\bar{r}) = \sum_{\bar{G}} U_{\bar{G}} \exp(i\bar{G}\bar{r})$$

Schrödinger: $\underbrace{\left[-\frac{\hbar}{2m}\nabla^2 + U(\bar{r})\right]}_{H}\psi(\bar{r}) = \overset{\text{energi}}{\varepsilon}\,\psi(\bar{r})$

med $U=0$ har vi lösngar $\begin{cases} \psi \cong \exp(i\bar{k}\bar{r}) \\ \varepsilon = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m} \end{cases}$

Vad gör $U \neq 0$? $\Rightarrow$ Testa att verka med $U(\bar{r})$ på $\exp(i\bar{k}\bar{r})$!

$$U(\bar{r})\exp(i\bar{k}\bar{r}) = \sum_{\bar{G}} U_{\bar{G}} \exp(i(\bar{k}+\bar{G})\bar{r})$$

summa (linjär superposition) av planvågor med vågtal $\bar{k}+\bar{G}$ för alla $\bar{G} = h\bar{b}_1 + k\bar{b}_2 + l\bar{b}_3$

Lösningarna till $H\psi = \varepsilon\psi$ på formen:

$$\psi_{\bar{k}}(\bar{r}) = \sum_{\bar{G}} a_{\bar{k}\bar{G}} \exp[i(\bar{k}+\bar{G})\bar{r}] =$$

$$= \exp(i\bar{k}\bar{r}) \sum_{\bar{G}} a_{\bar{k}\bar{G}} \exp(i\bar{G}\bar{r}) =$$

$$= \underbrace{\exp(i\bar{k}\bar{r})}_{\text{ej periodisk}} \underbrace{e_{\bar{k}}(\bar{r})}_{\text{periodisk}}$$

Blochs teorem

Egenfktner till SE i en periodisk potential är på formen planvåg $(\exp(i\bar{k}\bar{r})) \times$ (fkn med samma periodicitet som gittret)

Energiband

SE på $\varphi_{\bar{k}}(\bar{r}) = \exp(i\bar{k}\bar{r}) \sum_{\bar{G}} a_{\bar{k}\bar{G}} \exp(i\bar{G}\bar{r})$

$$H\varphi_{\bar{k}}(\bar{r}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \sum_{\bar{G}} U_{\bar{G}} \exp(i\bar{G}\bar{r})\right]\left(\sum_{\bar{G}} a_{\bar{k}\bar{G}} \exp(i\bar{G}\bar{r})\right)\exp(i\bar{k}\bar{r})$$

$$= \sum_{\bar{G}} a_{\bar{k}\bar{G}}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}(\bar{k}+\bar{G}')^2 \exp(i(\bar{k}+\bar{G}')\bar{r}) + \sum \exp(i(\bar{k}+\bar{G}+\bar{G}')\bar{r})U_{\bar{G}}\right]$$

$$= \varepsilon \varphi_{\bar{k}}(\bar{r})$$

$$= \varepsilon \sum_{\bar{G}'} a_{\bar{k}\bar{G}'} \exp[i(\bar{k}+\bar{G})\bar{r}]$$

Lös denna? planvågorna $\exp(i\bar{k}\bar{r})$ och $\exp(i\bar{k}'\bar{r})$ är ortogonala för $\bar{k} \neq \bar{k}'$ $\left(\int d^3r \exp(i\bar{k}\bar{r} - i\bar{k}'\bar{r}) \sim \delta(\bar{k}-\bar{k}')\right)$

vi identifierar koefficienter för varje planvåg

ex. $\exp(i\bar{k}\bar{r})$: $\quad a_{\bar{k}\bar{0}}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}k^2\right) + \sum_{\bar{G}} a_{\bar{k},-\bar{G}} U_{\bar{G}} = \sum a_{\bar{k}\bar{0}}$

uppsättning sådana ekvationer! .....

dafuq? o.O

Homogent linjärt ekv.system för koeff. $a_{\bar{k}\bar{G}}$, alla $\bar{G}$

Skriv som matris, ska vara $= 0$!

Hitta alla lösn. s.a. $\det(M) = 0$

(annars finns invers $M^{-1} \Rightarrow M^{-1} M \left[\text{koeff.} \right] = M^{-1} 0$

Ger uppsättning egenvärden $\varepsilon_{\bar{k}n}$, $n = 1, 2, 3, \ldots$

där $\varepsilon_{\bar{k}1} < \varepsilon_{\bar{k}2}$ och egenvektorer $\Rightarrow \psi_{\bar{k}n}$

$\{ n$ - bandindex $\}$