Repetition

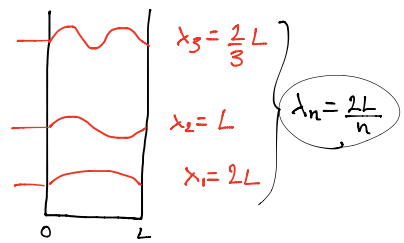
- ström genom drift/diffusion
- Halleffekt – kan mäta n av valenselektroner
- Värmekapacitet: $C_V \sim 3kN_A$ / mol

Metall som oändlig kvantbrunn (kap 4)

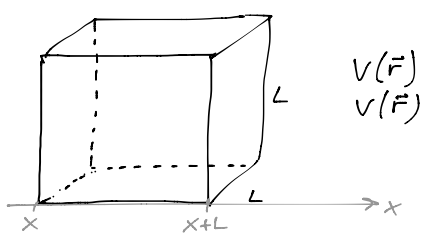
- metallbit som ∞ brunn: $V(x) = 0$ inuti brunnen och ∞ utanför
- valenselektroner delokaliserade över hela brunnen:
- Ingen växelverkan mellan e^-
- $F = -\nabla V$
- 1-dim låda:

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = E\psi(x) \\ \psi(0) = \psi(L) = 0 \end{cases} \Longrightarrow \quad \psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{k\pi x}{L}\right)$$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{\pi}{L}\cdot n$$



- 3D-brunn (mer verklighetstroget)



$V(\vec{r})$ inne $= 0$
$V(\vec{r})$ ute $= \infty$

$k_i = \frac{\pi}{L}n_i$ för fixa RV, $\vec{k} = (k_x, k_y, k_z)$

$$\Rightarrow \boxed{E = \frac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\pi^2}{L^2}(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)}$$

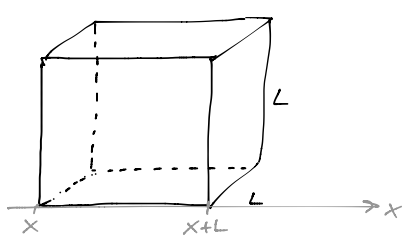
Sätter vi ex $L = 1$ mm och $n = 10^{28}\ m^{-3} \Rightarrow N = n\cdot V = 10^{19}$ st valenselektroner i kuben

Fixa RV: $\psi(x,t) \propto \sin(kx)e^{i\omega t}$ ← stående våg $\left(\omega = \frac{E}{\hbar}\right)$. Vi vill hellre ha gående vågor ⇒ ström

– gående våg $\psi(x,t) \propto e^{i(kx - \omega t)}$

för att få gående våg måste vi ändra våra RV från fixa till $\boxed{\text{periodiska}}$. (vågtalet och derivatan av $\psi(0) = \psi(L)$)

3D: $\psi(\vec{r},t) \propto e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)}$, $\psi(\vec{r}) \propto e^{i(k_x x + k_y y + k_z z)}$



RV ger nu $\psi(x,y,z) = \psi(x+L,y,z) = \psi(x,y+L,z) = \psi(x,y,z+L)$

x-led: $e^{ik_x x} = e^{ik_x(x+L)} \Rightarrow k_x = \frac{2\pi}{L}\cdot n_x$, $n_x = 0, \pm1, \pm2, \ldots$

Fixa RV

$k = \frac{\pi}{L} \cdot n$

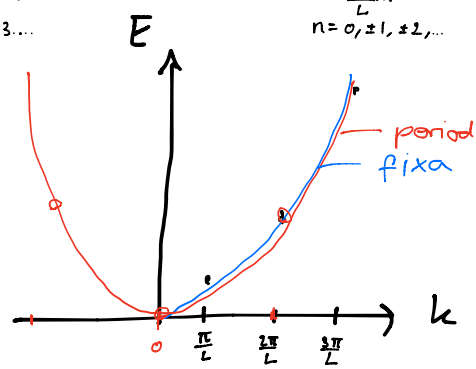
$n = 1, 2, 3 \ldots$

Periodiska RV

$k = \frac{2\pi}{L} \cdot n$

$n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$

periodisk
(ingen destruktiv interferens)



periodiska
fixa

$\boxed{\text{FRIELEKTRONPARABEL}}$

Operator för kinetisk energi: $H = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$, $p = -i\hbar\frac{d}{dx}$

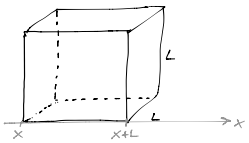
	H		p	
stående våg: $\sin(kx)$	$\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$	Ja	—	Nej
gående våg: e^{ikx}	$\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$	Ja	$\hbar k$	Ja

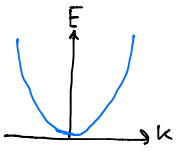
egenfunktioner?

$\langle p \rangle = 0$ för stående vågor!

Egenvärden

- Tillståndstäthet:

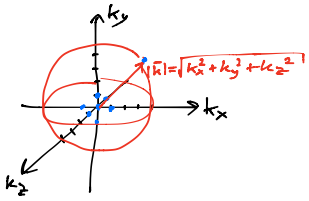




$Z(E) = \frac{dS(E)}{dE}$, $S(E)$ antal tillstånd med energi mindre än E

$dS(E) = dZ(E)\,dE$: Antal tillstånd mellan E & $E+dE$

$E = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m}$



Energin hos elektronerna med grina k-tal

Alla tillstånd under en viss energi E ligger inom en radie $k = |\vec{k}|$ $\longrightarrow$ $S(k) = 4\pi k^3$ /volym ach

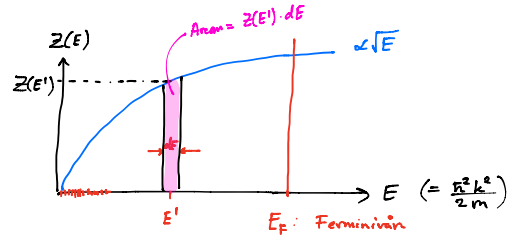
Volym per k-punkt: $\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3 \Rightarrow S(k) = \underbrace{\frac{4\pi k^3}{3}}_{\text{volym av sfär}} \cdot \underbrace{2}_{\text{2 spinntillstånd}} \cdot \underbrace{\frac{L^3}{(2\pi)^3}}_{\text{volym/k-punkt}}$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Rightarrow S(E) = \frac{2L^3}{(2m)^3} \cdot \frac{4\pi}{3} \cdot \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{3/2} \Rightarrow Z(E) = \frac{dS(E)}{dE} = 4\pi L^3 \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \cdot \sqrt{E}$$

$$\boxed{\text{Så, } Z(E) = \frac{dS(E)}{dE} = 4\pi L^3 \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \cdot \sqrt{E}}$$

Tillståndstätheten. Egenskaper: 3D och frielektronresultat

Metallens grundtillstånd vid $T = 0$ K

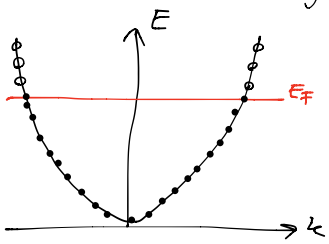


Antalet elektroner i provet ges av $N = n \cdot L^3 = \int_0^{E_F} Z(E)\,dE = (\dots) = \underbrace{C}_{\text{konst.}} \cdot \frac{2}{3} (E_F)^{3/2} \Rightarrow E_F =$

$$\Rightarrow \boxed{E_F = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{3n}{8\pi}\right)^{2/3}}$$ Fermi-energi

Normalt ligger $E_F \sim 5$–10 eV. Jämför vi då med vår uträkning från tidigare: $E_{kin} = \frac{3}{2} kT \sim \frac{1}{40}$ eV

$\Rightarrow$ Pauliprincipen tvingar upp energin rejält. Tillstånden i energiparabeln är fyllda för $T = 0$ K. Ökas $T \to 300$ K, så kommer dock energin inte att förändras nämnvärt.



← Så ser det ut om $T = 0$ K. Vid $T = 300$ K hoppar enstaka elektroner upp ovanför E_F

Om $E_F \sim E_{kin}$ måste $T \approx 50\,000$ K!