För metaller inom FEM: $E_F(T) < 0$, $e^{E_F(T)/kT} \ll 1$

Villkor för klassisk gräns: $N = n \cdot L^3 = \int_0^\infty Z(E) F(E) = [F(E) \ll 1] \approx \int_0^\infty C\sqrt{E} \cdot e^{-(E-E_F(T))/kT} dE$

$$n = \underbrace{e^{-E_F(T)/kT}}_{\ll 1} \cdot \frac{2}{h^3} \cdot (2\pi m k T)^{3/2}$$

Klassisk gas: • n låg ($n_{metall} \sim 10^{28} m^{-3}$)
• T hög ($T \sim 300K$)

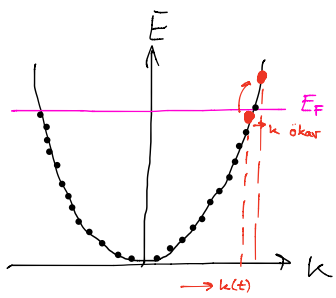
För metaller klassiskt om $E_F(T=0) \ll kT$

Vi återgår nu till kap. 2. Kondulktivitet $\mathcal{E} \neq 0$. v_d överlagrad på v_{th}

$$m \frac{dv}{dt} = F = -e\mathcal{E} + \text{spridning} \Longrightarrow \boxed{v_d = (-) \frac{e\mathcal{E}\tau}{m}}$$

$p = mv = \hbar k$ Kvantmekanikt

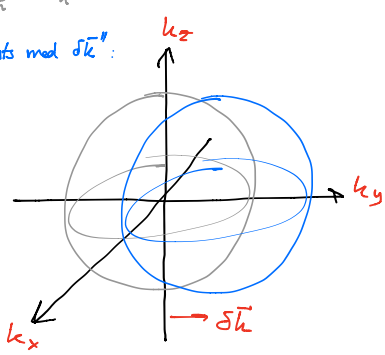
$\Rightarrow \hbar \frac{dk}{dt} = -e\mathcal{E} \Longrightarrow k(t) = k_0 - \frac{e\mathcal{E}t}{m}$ ← hm, verkar få samma problem som klassiskt: oändlig acceleration.



$\Rightarrow$ Inför spridningstid τ

$$\delta\vec{k} = \vec{k}(\tau) - \vec{k}(0) = \frac{e\mathcal{E}\tau}{\hbar} = \frac{m}{\hbar}\vec{v}_d$$

"Fermisfären förskjuts med $\delta\vec{k}$":



$\vec{J} = ne\vec{v}_d$. "Spridningsprocesser involverar framförallt elektroner nära Fermienergin."

Fermienergin $E_F = \frac{mv_F^2}{2}$ $\Rightarrow$ spridningslängden $\boxed{l = v_F \cdot \tau}$ Fermihastighet!!!

Kollisioner sker alltså inte som tidigare tänkt (dvs elektroner som krockar med joner) utan pga

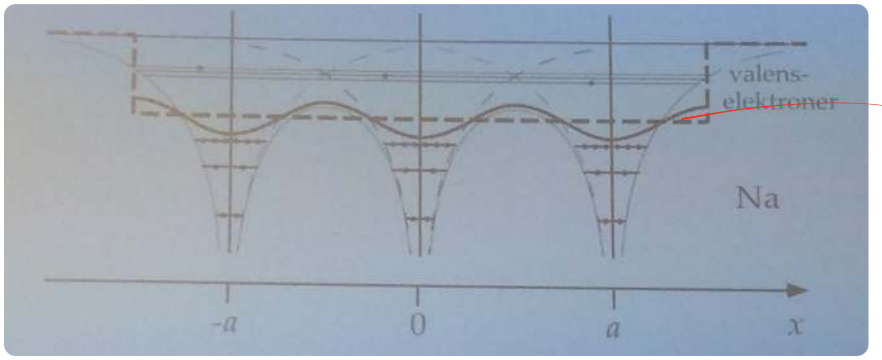
- ovenheter i kristallen
- atomära vibrationer — τ länge för lägre T alltså?

$\Rightarrow$ Cu: $T=300K$: $\tau = 10^{-14}\,s \rightarrow l = 10^{-8}\,m > a_0$

$T = 77K$: $\tau = 10^{-13}\,s \rightarrow l = 10^{-7}\,m \gg a_0$

$T = 4K$: $\tau = 10^{-9}\,s \rightarrow l = 10^{-3}\,m \ggg a_0$! Aha!

Bandstrukturer (kap 5)



Förfinar modellen med varierande potentialbotten i (den periodiska oändliga) lådan.

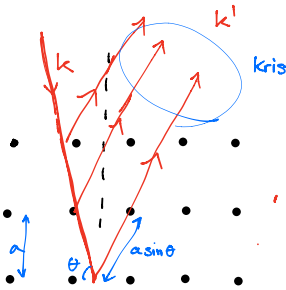
$H\phi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\phi + V(x)\phi = E\phi$ pga ändrad potential är inte längre $\phi^0 \propto e^{ikx}$ lösning

• Braggspridning:

Braggs lag: $2a\sin\theta = n\lambda$

normalt infall: $2a = n\lambda$

$\Rightarrow \boxed{k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi}{2a}n = \frac{\pi}{a}\cdot n}$



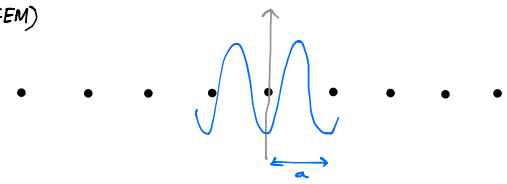
Kristallens periodicitet avgörande för god konstruktiv interferens

$V(x)$ är periodisk $\Rightarrow$ gissar lösning på formen $\phi \sim e^{ikx} \pm e^{-ikx}$ $\boxed{\text{om } k = \frac{\pi}{a}n}$

$\Downarrow$

$\phi \sim \sin\left(\frac{\pi}{a}x\right)$ och $\cos\left(\frac{\pi}{a}x\right)$ om $n=1$!

- Nästan-frielektronmodellen (NFEM)
  - Svag $V(x)$
  - 1-dimensionell



Vi ansätter $V(x) = -V_0 \cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right)$, och hamiltonoperatorn $\mathbb{H} = \mathbb{H}^0 + V(x)$, $\mathbb{H}^0 = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}$, där lösningarna är

$E_n^0 = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}$ och $\phi^0 = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ik_n x}$

$\Downarrow$

1:a ordningens störningsräkning ger $E_n = \langle \phi_n^0 | \mathbb{H} | \phi_n^0 \rangle = E_n^0 + \langle \phi_n^0 | V(x) | \phi_n^0 \rangle = E_n^0 + \frac{1}{L}\int_0^L e^{-ikx} V(x) e^{ikx} dx =$

Ger inget bidrag! $\longrightarrow$ $= E_n^0 + \frac{1}{L}\int_0^L V(x)\,dx = E_n^0$

Vi ansätter då att nya vågfunktioner är superposition av gamla: $\phi_n = c_1 \phi_1^0(x) + c_2 \phi_2^0(x)$

$\mathbb{H}\phi(x) = E\phi(x)$

$\Updownarrow$

$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(c_1\phi_1^0 + c_2\phi_2^0\right) + V(x)\left(c_1\phi_1^0 + c_2\phi_2^0\right) = E\left(c_1\phi_1^0 + c_2\phi_2^0\right)$

$\Downarrow$

$c_1 E_1^0 \phi_1 + c_2 E_2^0 \phi_2 + \text{———} \overset{\text{samma}}{=} \text{———}$

multiplicera från vänster med ϕ_1^{0*}! $\Rightarrow$

Fortsätt nästa föreläsning