Eðlisfræði þéttefnis I:

Flutningsferli

Kafli 8

Jón Tómas Guðmundsson

tumi@hi.is

9. vika haust 2018

Inngangur

- Ýmsir eiginleikar svo sem rafleiðni og varmaleiðni byggja á flutningseiginleikum rafeinda í þéttefni
- Ef bylgjuvigurinn **k** er skilgreindur nákvæmlega þá þýðir það að óvissa er á staðsetningu rafeindar í raunrúminu þar sem bylgjufallið liggur á öllum $x-$ásnum
- Ef hins vegar rafeindin er skilgreind á bili Δx, þá er skriðþunginn, eða bylgjuvigurinn óákveðinn
- Þetta stafar af óvissulögmálinu

$$\Delta p \cdot \Delta x = \hbar \Delta k \cdot \Delta x \sim \hbar$$

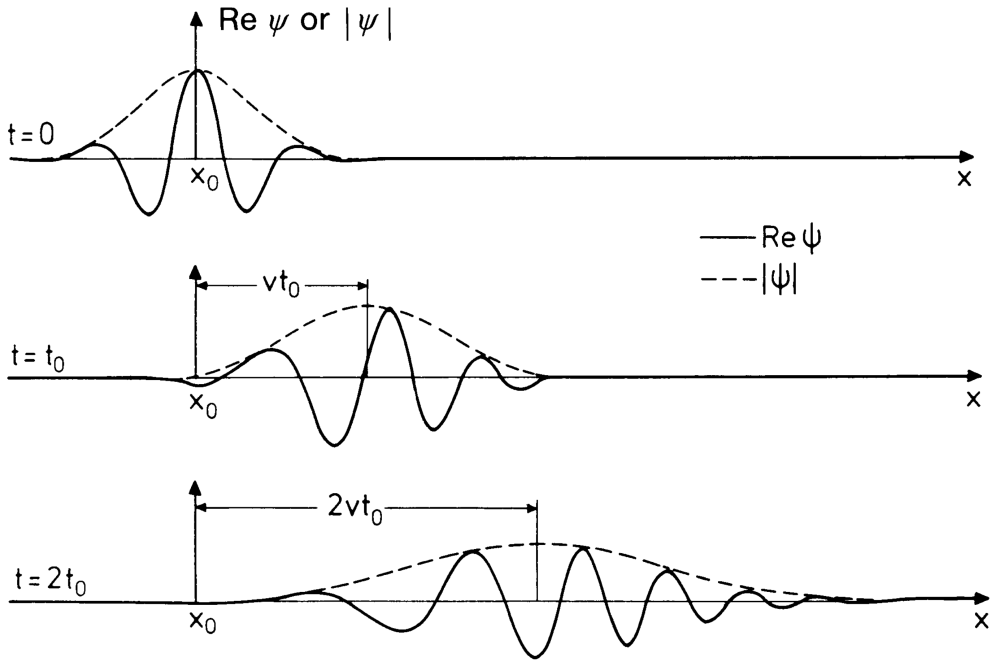
Hreyfing rafeinda í borða og virkur massi

- Stærðfræðilega má lýsa staðsetningu með því að lýsa rafeind sem bylgjupakka

$$\psi(x,t) \sim \int_{k-\frac{\Delta k}{2}}^{k+\frac{\Delta k}{2}} a(k) \exp\left[j(kx - \omega(k)t\right] \mathrm{d}k$$

þar sem $\omega(k)$ er tvístrunarsambandið

Hreyfing rafeinda í borða og virkur massi



Frá Ibach and Lüth (2009)

- Færsla bylgjupakka í raunrúminu

Hreyfing rafeinda í borða og virkur massi

- Hliðrunarhreyfingu bylgjupakkans er lýst með hneppishraðanum

$$v_{\mathrm{g}} = \frac{\partial \omega}{\partial k}$$

sem er hraði massamiðju bylgjupakkans sem er ekki sama og fasahraði planbylgju

$$c = \frac{\omega}{k}$$

- Í kristalli er rafeindum lýst með Bloch bylgjum

- Hraða rafeindar í kristalli er því lýst með hneppishraða Bloch bylgjupakkans

$$\mathbf{v}_{\mathrm{g}} = \nabla_{\mathbf{k}} \omega(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \mathcal{E}(\mathbf{k})$$

Hreyfing rafeinda í borða og virkur massi

- Fyrir frjálsa rafeind $\mathcal{E} = \hbar^2 k^2/2m$ fæst

$$v = \frac{k\hbar}{m} = \frac{p}{m}$$

- Rafeind í kristalli í ytra rafsviði yfir tímabil δt fær aukna orku sem nemur

$$\delta\mathcal{E} = -eEv_{\mathrm{g}}\delta t$$

þar sem v_{g} er hneppishraðinn

- Þannig að

$$\delta\mathcal{E} = \nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k})\delta\mathbf{k} = \hbar\mathbf{v}_{\mathrm{g}} \cdot \delta\mathbf{k}$$

Hreyfing rafeinda í borða og virkur massi

- Með samanburði sjáum við

$$\delta k = -\frac{eE}{\hbar}\delta t$$

og þar með

$$\hbar\frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}t} = -eE = F$$

sem er hreyfijafna fyrir frjálsa rafeind

- Kraftliðurinn getur einnig innihaldið Lorentz kraftinn sem verkar á rafeind í segulsviði, það er ef segulsviðið er ekki það sterkt að það brjóti niður borðastrúktúrinn

Hreyfing rafeinda í borða og virkur massi

- Hreyfijafnan er þá fyrir fast segulsvið

  $$\hbar \frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}t} = -e\mathbf{v} \times \mathbf{B}$$

  eða

  $$\frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}t} = -\frac{e}{\hbar^2} \nabla_{\mathbf{k}} \mathcal{E}(\mathbf{k}) \times \mathbf{B}$$

- Við sjáum að rafeindin ferðast í $\mathbf{k}$ rúminu í stefnu sem er hornrétt á stigul orkunnar eða að rafeindin ferðast á fastorkuyfirborði

Hreyfing rafeinda í borða og virkur massi

- Útfrá ofansögðu sjáum við að

$$\dot{v}_{gi} = \frac{1}{\hbar}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\nabla_{\mathbf{k}}\mathcal{E}\right)_{gi} = \frac{1}{\hbar}\sum_j \frac{\partial^2\mathcal{E}}{\partial k_i \partial k_j}\dot{k}_j = \frac{1}{\hbar^2}\sum_j \frac{\partial^2\mathcal{E}}{\partial k_i \partial k_j}(-eE_j)$$

og ef borið er saman við

$$F = ma$$

eða

$$a = \frac{F}{m}$$

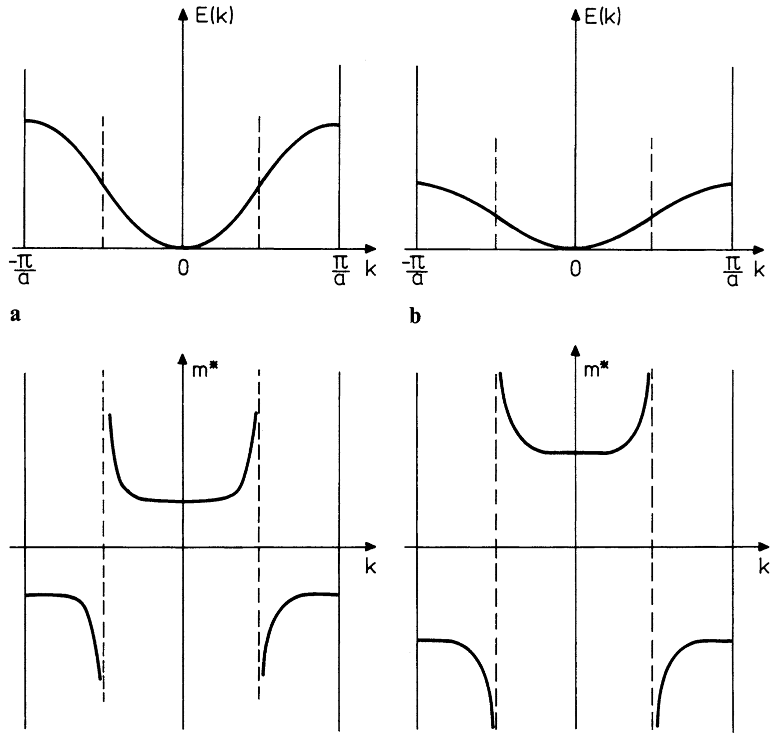
sjáum við

$$\dot{v}_g = \frac{(-eE)}{m}$$

Hreyfing rafeinda í borða og virkur massi

- Massanum m er skipt út fyrir **virkan massa** (e. effective mass) m^*_{ij} þar sem
$$\left(\frac{1}{m^*}\right)_{ij} = \frac{1}{\hbar^2}\frac{\partial^2 \mathcal{E}}{\partial k_i \partial k_j}$$
og er einfaldlega krappi $\mathcal{E}(\mathbf{k})$
- Þetta er þinill (e. tensor) sem er samhverfur
- Athugið að m^* er háð $\mathbf{k}$

Hreyfing rafeinda í borða og virkur massi



Frá Ibach and Lüth (2009)

- Virkur massi

Straumur í borðum

- Hvernig leggja rafeindir með ólíka $\mathbf{k}$-vigra til straumsins ?
- Rúmstak $\mathrm{d}\mathbf{k}$ við $\mathbf{k}$ leggur til straumþéttleika

$$\mathrm{d}\mathbf{j}_n = v(\mathbf{k})\frac{\mathrm{d}\mathbf{k}}{8\pi^3} = \frac{1}{8\pi^3\hbar}\nabla_{\mathbf{k}}\mathcal{E}(\mathbf{k})\mathrm{d}\mathbf{k}$$

þar sem ástandsþéttleiki í $\mathbf{k}$-rúminu er $[V/(2\pi)^3]$ eða $[1/(2\pi)^3]$

- Þar með er fyrir fullsetinn borða

$$\mathbf{j} = -\frac{e}{8\pi^3\hbar}\int_{\text{1st BZ}} \nabla_{\mathbf{k}}\mathcal{E}(\mathbf{k})\mathrm{d}\mathbf{k}$$

Straumur í borðum

- Fyrir

$$v(\mathbf{k}) = \nabla_{\mathbf{k}} \mathcal{E}(\mathbf{k})/\hbar$$

  er einnig framlag frá $v(-\mathbf{k})$ og

$$\mathcal{E}(\mathbf{k}) = \mathcal{E}(-\mathbf{k})$$

- Heildar straumurinn er tegur yfir setin ástönd í hlutfylltum borða og má því líta á sem straum jákvætt hlaðinna ósetinna ástanda í borðanum
- Þessar quasiagnir eru þekktar sem **holur**
- Þær uppfylla hreyfijöfnurnar
- Holur hegða sér eins og jákvætt hlaðnar agnir

Straumur í borðum

- Við toppinn gildir fleygboganálgun

$$\mathcal{E}(\mathbf{k}) = \mathcal{E}_0 - \frac{\hbar^2 k^2}{2|m^*_\wedge|}$$

og $m^*_\wedge$ táknar virkan massa við hámark borðans undir rafsviði

$$\dot{\mathbf{v}} = \frac{1}{\hbar}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left[\nabla_{\mathbf{k}}\mathcal{E}(\mathbf{k})\right] = -\frac{1}{|m^*_\wedge|}\hbar\dot{\mathbf{k}} = \frac{e}{|m^*_\wedge|}E$$

$\Longrightarrow$ Dæmi 8.1.

Boltzmann jafnan og slökunartími

- Flutningsferli hlíta tveimur drífandi kröftum vegna ytra rafsviðs og dreifingu á hleðsluberum vegna hljóðeinda og veilna
- Þessu samspili er lýst með jöfnu Boltzmann
- Við höfum áhuga á að skoða hvernig dreifing hleðslubera í varmajafnvægi er breytt með ytri kröftum og dreifingarferlum
- Við byrjum með Fermi dreifinguna

$$f_0(\mathcal{E}(\mathbf{k})) = \frac{1}{\exp\left(\frac{\mathcal{E}(\mathbf{k})-\mathcal{E}_\mathrm{F}}{k_\mathrm{B}T}\right)+1}$$

sem er jafnvægisdreifingin f_0 og er óháð staðsetningu þar sem gert er ráð fyrir einsleitni

Boltzmann jafnan og slökunartími

- Skoðum hvað gerist í ytra sviði
- Undir álögðu ytra rafsviði E hefur rafeind við $\mathbf{r}$ og $\mathbf{k}$ við tímann t hnitin
$$\mathbf{r} - \mathbf{v}(\mathbf{k})\mathrm{d}t$$
og
$$\mathbf{k} - (-e)E\frac{\mathrm{d}t}{\hbar}$$
- Ef engir eru árekstrar, þá er sérhver rafeind með hnit $\mathbf{r} - \mathbf{v}\mathrm{d}t$ og $\mathbf{k} + eE\frac{\mathrm{d}t}{\hbar}$ við $t - \mathrm{d}t$ verður að koma til $\mathbf{r}$, $\mathbf{k}$ við tíma t
$$f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) = f\left(\mathbf{r} - \mathbf{v}\mathrm{d}t, \mathbf{k} + eE\frac{\mathrm{d}t}{\hbar}, t - \mathrm{d}t\right)$$

Boltzmann jafnan og slökunartími

- Með árekstrum

$$f(t+\mathrm{d}t,\mathbf{r}+\mathrm{d}\mathbf{r},\mathbf{v}+\mathrm{d}\mathbf{v}) - f(t,\mathbf{r},\mathbf{v}) = \mathrm{d}t\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\mathrm{arekstrar}}$$

þannig að

$$\mathrm{d}t\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right) + \mathrm{d}\mathbf{r}\nabla_{\mathbf{r}} f + \mathrm{d}\mathbf{v}\nabla_{\mathbf{v}} f = \mathrm{d}t\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\mathrm{arekstrar}}$$

og táknum hröðunarliðinn með

$$\alpha = \frac{\mathrm{d}\mathbf{v}}{\mathrm{d}t}$$

Boltzmann jafnan og slökunartími

- Þannig að

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right) + \mathbf{v}\nabla_{\mathbf{r}} f + \alpha \nabla_{\mathbf{v}} f = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\mathrm{arekstrar}}$$

  sem er flutningsjafna Boltzmann

- Oft má rita árekstrarliðinn með því að innleiða slökunartímann $\tau_{\mathrm{c}}(\mathbf{r}, \mathrm{v})$ skilgreindan með

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\mathrm{arekstrar}} = -\frac{f - f_0}{\tau_{\mathrm{c}}}$$

- Segjum að ójafnvægi í hraðadreifingu komi til vegna ytra sviðs sem er snögglega fjarlægt

Boltzmann jafnan og slökunartími

- Þá er slökun dreifingarinnar í átt að jafnvægi

$$\frac{\partial(f - f_0)}{\partial t} = -\frac{f - f_0}{\tau_c}$$

og þar sem $\partial f_0/\partial t = 0$ samkvæmt skilgreiningu þá hefur þessi jafna lausnina

$$(f - f_0)_t = (f - f_0)_{t=0} \exp\left(-\frac{t}{\tau_c}\right)$$

þá er Boltzmann jafnan

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \alpha \nabla_{\mathbf{v}} f + \mathbf{v} \nabla_{\mathbf{r}} f = -\frac{f - f_0}{\tau_c}$$

eða

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v}_0 \nabla_{\mathbf{r}} f - \frac{e}{\hbar} \mathcal{E} \nabla_{\mathbf{k}} f = -\frac{f - f_0}{\tau_c}$$

Boltzmann jafnan og slökunartími

- Ef f er óháð staðsetningu $\nabla_{\mathbf{r}} f = 0$ þá er

$$-\frac{e}{\hbar} E \nabla_{\mathbf{k}} f = -\frac{f - f_0}{\tau_c}$$

  og

$$f(\mathbf{k}) = f_0(\mathbf{k}) + \frac{e}{\hbar} E \tau_c \nabla_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k})$$

- Diffurjöfnuna má leysa með ítrun með því að nálga $f(\mathbf{k})$ í $\nabla_{\mathbf{k}} f$ liðnum með jafnvægisdreifingunni

- Þetta gefur lausn sem er línuleg í E sem aftur er stungið inn í diffurjöfnuna

Boltzmann jafnan og slökunartími

- Línulega Boltzmann jafnan er

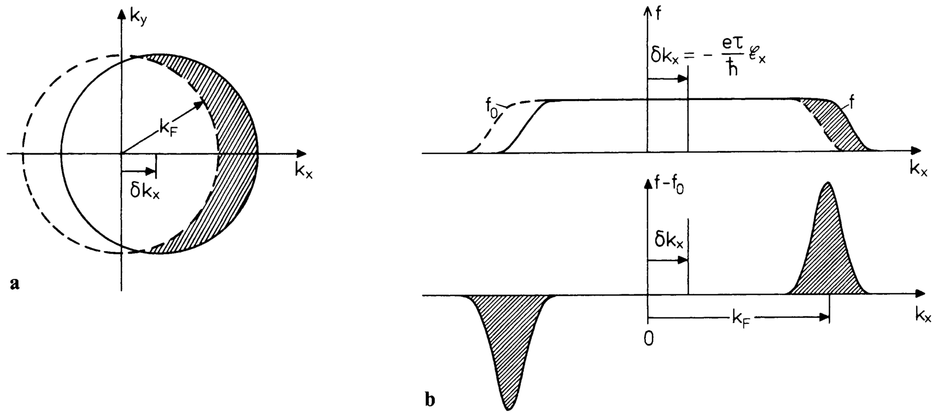
$$f(\mathbf{k}) \simeq f_0(\mathbf{k}) + \frac{e}{\hbar} E\tau_{\mathrm{c}} \nabla_{\mathbf{k}} f_0(\mathbf{k})$$

og ef rafsviðið er lítið má taka liðun á f_0 þannig að

$$f(\mathbf{k}) \simeq f_0 \left(\mathbf{k} + \frac{e}{\hbar} E\tau_{\mathrm{c}} \right)$$

þannig að dreifing vegna ytra rafsviðs E ásamt með árekstrum má því lýsa með Fermi dreifingu sem er hliðrað með $eE\tau_{\mathrm{c}}/\hbar$ frá jafnvægi

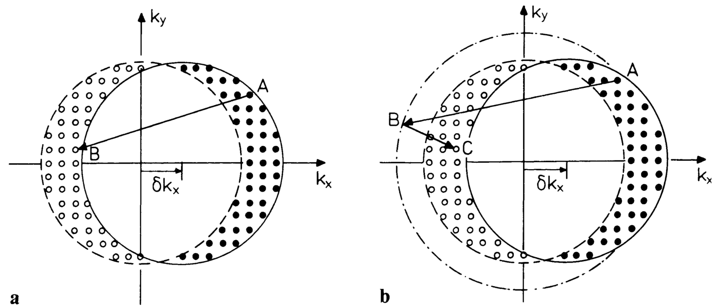
Boltzmann jafnan og slökunartími



Frá Ibach and Lüth (2009)

- Áhrif fasts rafsviðs E_x á dreifingu rafeinda í $\mathbf{k}-$rúminu
- Fermi kúlunni er hliðrað sem nemur $\delta\mathbf{k} = -e\tau E_x/\hbar$
- Hin nýja Fermidreifing víkur aðeins frá upphaflegri dreifingu í nágreinni við Fermiorkustigið

Boltzmann jafnan og slökunartími



Frá Ibach and Lüth (2009)

- Dreifing rafeinda í $\mathbf{k}-$rúminu
- Brotna línan sýnir Fermiyfirborð í varmajafnvægi $(E = 0)$
- Þegar lagt er á rafsvið E_x og fastur straumur, þá færist Fermi yfirborðið eins og sýnt er með heila hringnum
- En þar sem A og B eru í mismunandi fjarlægð frá upphafspunkti hnitakerfisins verður þannig að til verður að koma ófjaðrandi atburður
- Ef dreifingin er fjaðrandi verður Fermi kúlan að stækka

Leiðni í málmum – líkan Drude

- Drude lýsti leiðni í málmum með því að gera ráð fyrir rafeindagasi í þéttefninu
- Fyrir slíkt rafeindagas undir ytra rafsviði E, er hreyfifræði rafeinda lýst með hreyfijöfnunni
$$m\dot{v} + \frac{m}{\tau}v_{\mathrm{D}} = -eE$$
þar sem dreifingarliðurinn $(m/\tau)v_{\mathrm{D}}$ er núningur og $v_{\mathrm{D}} = v - v_{\mathrm{therm}}$ er rekhraði, sem er viðbótarhraði vegna sviðsins sem er umfram varmahraðann v_{therm}
- Þar sem v er slakað með veldisfalli aftur í varmahraðann með tímafasta τ_{c} þegar slökkt er á sviðinu, köllum við τ_{c} slökunartíma

Leiðni í málmum – líkan Drude

- Í æstæði ($\dot{v} = 0$) er
$$v_{\mathrm{D}} = -\frac{e\tau_{\mathrm{c}}}{m}E$$
og þess vegna er straumþéttleikinn
$$j = -env_{\mathrm{D}} = ne\mu E = \frac{e^2 n\tau_{\mathrm{c}}}{m}E$$
þar sem n er þéttleiki frjálsra rafeinda og μ er hreyfanleikinn, skilgreindur sem hlutfallsfasti milli rekhraða og rafsviðs
$$v_{\mathrm{D}} = \mu E$$

Leiðni í málmum – líkan Drude

- Sígild leiðni samkvæmt Drude líkaninu

$$\sigma = \frac{j}{E} = \frac{e^2 n \tau_c}{m}$$

og hreyfanleikinn

$$\mu = \frac{e\tau_c}{m}$$

- Í þessu einfalda líkani leggja allar frjálsar rafeindir til straumsins
- Þetta er í mótsögn við einsetulögmál Pauli
- Fyrir Fermigas þá er rafeindum vel neðan við Fermiorkustigsins meinað að bæta við sig orku þar sem öll nálæg orkustig eru setin

Leiðni í málmum – líkan Drude

- Skoðum nú strauminn út frá framlagi rafeinda í rúmmáls einingunni d$\mathbf{k}$ og aðeins setin sæti í $\mathbf{k}$-rúminu og sætnilíkur $f(\mathbf{k})$

$$j_n = \frac{1}{8\pi^3} \int_{\text{1st BZ}} v(\mathbf{k}) f(\mathbf{k}) \mathrm{d}\mathbf{k}$$

og fyrir rafsvið E_x í $x-$stefnuna

$$j = -\frac{e}{8\pi^3} \int \mathrm{d}\mathbf{k} v(\mathbf{k}) f(\mathbf{k}) = -\frac{e}{8\pi^3} \int \mathrm{d}\mathbf{k} v(\mathbf{k}) \left[f_0(\mathbf{k}) + \frac{e\tau_\mathrm{c}}{\hbar} E \frac{\partial f_0}{\partial k_x} \right]$$

fyrir einsleitt efni og teningsgrindur, $j_y = j_z = 0$

- Þar sem tegrað er yfir allt Brillouin svæðið og $f_0(\mathbf{k})$ er samhvert um $\mathbf{k} = 0$ þá núllast tegrið yfir $v_x f_0$

Leiðni í málmum – líkan Drude

- Einnig þar sem
$$\frac{\partial f_0}{\partial k_x} = \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \hbar v_x$$
höfum við
$$j_x = -\frac{1}{8\pi^3} E_x \int d\mathbf{k} v_x^2(\mathbf{k}) \tau_c(\mathbf{k}) \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}}$$
- Rafleiðnin er þá
$$\sigma = \frac{j_x}{E_x} = -\frac{e}{8\pi^3} \int d\mathbf{k} v_x^2(\mathbf{k}) \tau_c(\mathbf{k}) \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}}$$
- orkubilið sem Fermiorkudreifingin $f_0(\mathcal{E})$ breytist snögglega hefur breidd $\sim 4k_\mathrm{B}T$ og er samhverft um punktinn $(\mathcal{E}_\mathrm{F}, f_0(\mathcal{E}_\mathrm{F})) = \frac{1}{2}$

Leiðni í málmum – líkan Drude

- Þetta segir að góð nálgun er

$$\frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \approx -\delta(\mathcal{E} - \mathcal{E}_{\mathrm{F}})$$

- Einnig er

$$\mathrm{d}\mathbf{k} = \mathrm{d}f_{\mathrm{E}} \frac{\mathrm{d}\mathcal{E}}{|\nabla_{\mathbf{k}}\mathcal{E}|} = \mathrm{d}f_{\mathrm{E}} \frac{\mathrm{d}\mathcal{E}}{\hbar v(\mathbf{k})}$$

  þannig að

$$\sigma \simeq \frac{e^2}{8\pi^3\hbar} \int \mathrm{d}f_{\mathrm{E}} \mathrm{d}\mathcal{E} \frac{v_x^2(\mathbf{k})}{v(\mathbf{k})} \tau_c(\mathbf{k}) \delta(\mathcal{E} - \mathcal{E}_{\mathrm{F}})$$

  og þá

$$\sigma \simeq \frac{e^2}{8\pi^3\hbar} \int_{\mathcal{E}=\mathcal{E}_{\mathrm{F}}} \mathrm{d}\mathcal{E} \frac{v_x^2(\mathbf{k})}{v(\mathbf{k})} \tau_c(\mathbf{k}) \mathrm{d}f_{\mathrm{E}}$$

Leiðni í málmum – líkan Drude

- Almennt taka $v(\mathrm{k})$ og $\tau_{\mathrm{c}}(\mathrm{k})$ breytingum á Fermi yfirborðinu
- Meðalgildið
$$\left\langle \frac{v_x^2(\mathrm{k})}{\tau(\mathrm{k})} \right\rangle_{\mathcal{E}_{\mathrm{F}}}$$
yfir Fermiyfirborðið má taka út fyrir tegrið
- Fyrir Fermikúlu fyrir nánast frjálsar rafeindir með virkan massa m^* er þetta meðalgildi einfaldlega
$$\frac{v(\mathcal{E}_{\mathrm{F}})\tau(\mathrm{F})}{3}$$
- Rafleiðni málma er þess vegna yfirborðstegur yfir Fermi-yfirborð í $k-$rúmhnitinu
$$\mathcal{E}(\mathbf{k}) = \mathcal{E}_{\mathrm{F}}$$

Leiðni í málmum – líkan Drude

- Aðeins rafeindir nærri Fermiorkustigunum leggja til rafleiðninnar, eins og vænta má samkvæmt einsetulögmáli Pauli
- Hlutfall rafeinda sem taka þátt er $v_{\mathrm{D}}/v_{\mathrm{F}}$
- Þéttleiki þessara rafeinda er þess vegna

$$n\frac{v_{\mathrm{D}}}{v_{\mathrm{F}}}$$

og þar sem sérhver rafeind hefur nálega hraðann $-v_{\mathrm{F}}$ er straumþéttleikinn

$$j = -en\frac{v_{\mathrm{D}}}{v_{\mathrm{F}}}(-v_{\mathrm{F}}) = nev_{\mathrm{D}}$$

Leiðni í málmum – líkan Drude

- Ef
$$v_{\mathrm{D}} = -\left(\frac{e\tau_{\mathrm{c}}}{m^*}\right)E$$
fáum við
$$J = \frac{ne^2\tau_{\mathrm{F}}}{m^*}E$$
þar sem τ_{F} er árekstrartími rafeinda á Fermiyfirborðinu
- Rafleiðnin er þess vegna
$$\sigma = \frac{ne^2\tau_{\mathrm{F}}}{m^*}$$
sem er sama og fengið er sígilt nema hvað τ_{c} er skipt út fyrir τ_{F}
- Í raun er straumurinn aðeins borinn með fáum rafeindum sem ferðast á háum hraða, í stað þess að allar ferðist á rekhraðanum v_{D}
- Báðar aðferðir gefa sömu niðurstöðu

Leiðni í málmum – líkan Drude

- Þannig að við höfum

$$\sigma \simeq \frac{e^2 \tau_c(\mathcal{E}_F)}{m^*} n$$

og

$$\mu \simeq \frac{e^2 \tau_c(\mathcal{E}_F)}{m^*}$$

- Þessar jöfnur eru jafngildar Drude líkaninu
- Slökunartíminn, sem var ekki nákvæmlega skilgreindur þar er fyrir rafeindir við Fermi orkustigið, og virkan massa m^* í staða massa frjálsra rafeinda
- Heildarþéttleiki rafeinda í leiðniborða, sem einnig kemur fyrir í Drude líkaninu

Leiðni í málmum – líkan Drude

- Til þess að skoða hvernig viðnám málma breytist með hitastigi er nægjanlegt að líta til hvernig τ_c hegðar sér sem fall af hitastigi
- Dreifing hleðslubera stafar af hljóðeindum og veilum

$$\frac{1}{\tau_\mathrm{c}} = \frac{1}{\tau_\mathrm{ph}} + \frac{1}{\tau_\mathrm{defect}}$$

  þar sem τ_ph og τ_defect eru meðaltímar milli dreifingar frá hljóðeindum og veilum

- Þetta er nefnt **regla Mathiesen**

Leiðni í málmum – líkan Drude

- Fyrir dreifingu með hljóðeindum er líkindaþversnið drefingarinnar í réttu hlutfalli við meðaltal útslagsins

$$\langle u^2(\mathbf{q})\rangle$$

og

$$M\omega_{\mathrm{q}}\langle u^2(\mathbf{q})\rangle = k_{\mathrm{B}}T, \qquad T \gg \Theta$$

þannig að

$$\frac{1}{\tau_{\mathrm{ph}}} \sim \langle u^2(\mathbf{q})\rangle \sim \frac{k_{\mathrm{B}}T}{M\omega_{\mathrm{q}}^2}$$

og tíðni hljóðeindanna ω_{q}^2 inniheldur upplýsingar um fjaðureiginleika efnisins

Leiðni í málmum – líkan Drude

- Gróf nálgun er að setja í stað ω_{q}^2 Debye tíðnina $\omega_{\mathrm{D}} = k_{\mathrm{D}}\Theta/\hbar$ þar sem Θ er Debye hitastigið

$$\tau_{\mathrm{ph}} \sim \frac{M\Theta^2}{T} \quad \text{fyrir} \quad T \gg \Theta$$

- Fyrir hitastig $T < \Theta$, lækka líkur á hljóðeindaörvun ásamt með lækkandi orku hljóðeinda

- Fyrir $T < \Theta$ er viðnám málma

$$\rho_{\mathrm{ph}}(T) = A\left(\frac{T}{\Theta}\right)^5 \int_0^{\Theta/T} \frac{x^5 \mathrm{d}x}{(\exp x - 1)(1 - \exp(-x))}$$

sem er nefnd jafna Grüneisen

Leiðni í málmum – líkan Drude

- Við lág hitastig er

$$\rho_{\rm ph} \propto T^5$$

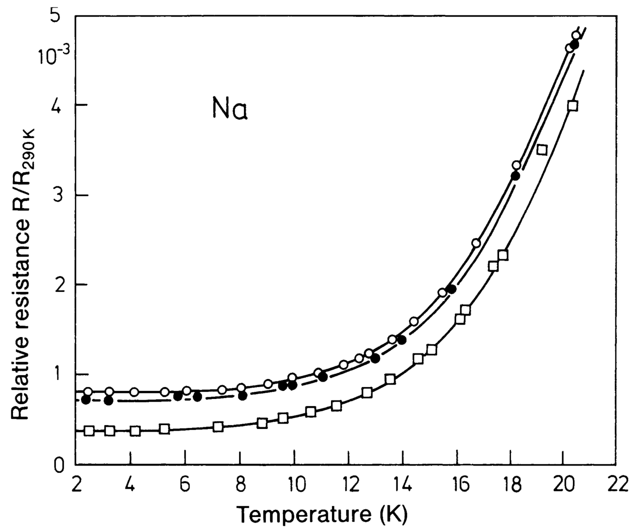
- Við hærri hitastig stefnir tegrið á

$$\frac{1}{4}\left(\frac{T}{\Theta}\right)^4$$

svo að

$$\rho_{\rm ph} \propto T$$

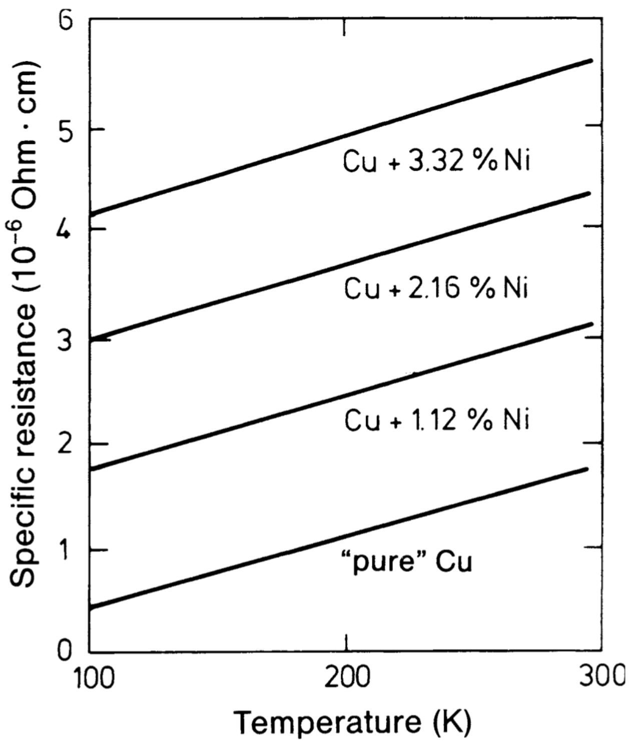
Leiðni í málmum – líkan Drude



Frá Ibach and Lüth (2009)

- Viðnám Na sem fall af hitastigi
- Neðan við 8 K er viðnámið nánast óháð hitastig, en ræðst af veiluþéttleika í sýninu
- Við hærri hitastig er hegðuninni lýst með Grüneisen jöfnunni og ofan við 18 K er hækkar viðnámið línulega með hitastigi

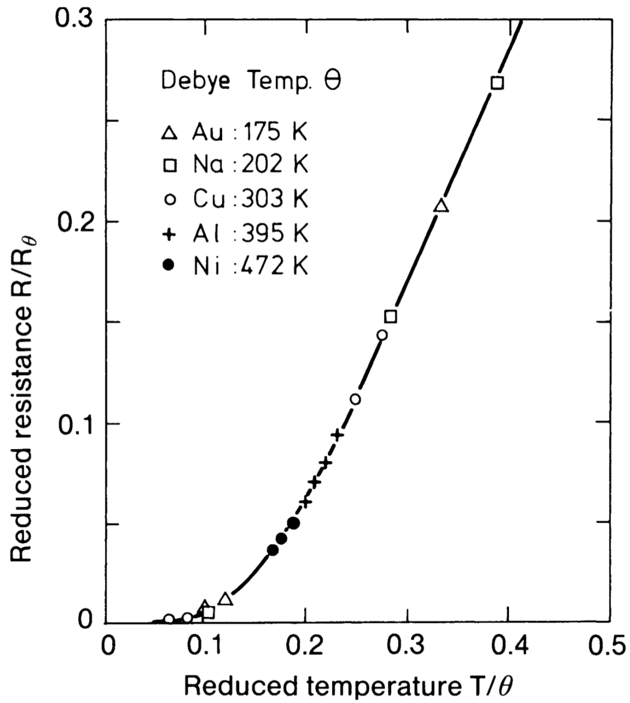
Leiðni í málmum – líkan Drude



Frá Ibach and Lüth (2009)

- Áhrif veiluþéttleika á leiðni kopars

Leiðni í málmum – líkan Drude



Frá Ibach and Lüth (2009)

- Hér sést að Grüneisen jafnan fellur að leiðni ýmissa málma

Hreyfing í segulsviði

- Hreyfijafna við hliðrun Fermikúlu agna um $\delta\mathbf{k}$ þegar kraftur verkar og núningur sem er lýst með árekstri

$$\hbar\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}+\frac{1}{\tau}\right)\delta\mathbf{k}=F$$

- Hröðun frjálsrar agnar er lýst með liðnum

$$\hbar\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\right)\delta\mathbf{k}$$

og áhrif árekstra með

$$\hbar\frac{\delta\mathbf{k}}{\tau}$$

þar sem τ er árekstrartími

Hreyfing í segulsviði

- Gerum nú ráð fyrir hreyfingu undir einsleitu segulsviði
- Lorentz kraftur á rafeind er þá

$$\mathbf{F} = -\left(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}\right)$$

og ef

$$m\mathbf{v} = \hbar\delta\mathbf{k}$$

þá er hreyfijafnan

$$m\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} + \frac{1}{\tau}\right)\mathbf{v} = -e\left(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}\right)$$

Hreyfing í segulsviði

- Fyrir segulsvið sem liggur eftir $z-$ásnum þá eru hreyfijöfnuranr

$$m\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}+\frac{1}{\tau}\right)v_x=-e(E_x+Bv_y)$$

$$m\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}+\frac{1}{\tau}\right)v_y=-e(E_y-Bv_x)$$

$$m\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}+\frac{1}{\tau}\right)v_z=-eE_z$$

Hreyfing í segulsviði

- Í æstæði er tímaafleiðan núll svo rekhraðinn er

$$v_x = -\frac{e\tau}{m}E_x - \omega_c\tau v_y$$

$$v_y = -\frac{e\tau}{m}E_y + \omega_c\tau v_x$$

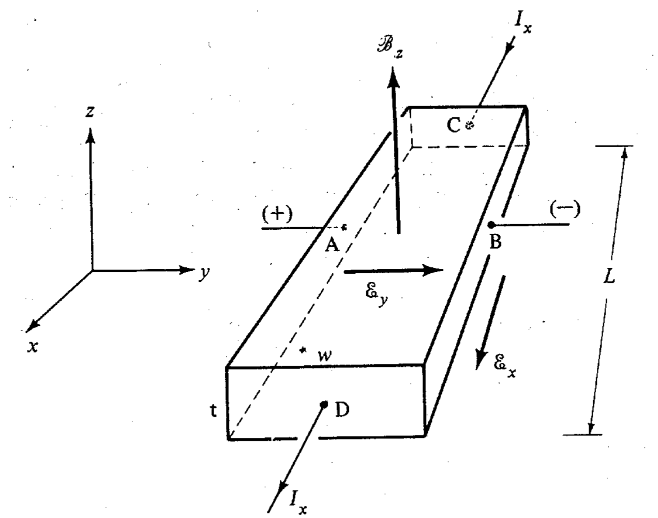
$$v_z = -\frac{e\tau}{m}E_z$$

  þar sem

$$\omega_c = \frac{eB}{m}$$

  er hringhraðal tíðni

Hreyfing í segulsviði: Hall hrif



- Hall svið er rafsvið sem liggur á milli tveggja hliða leiðara í stefnuna $\mathbf{j} \times \mathbf{B}$ þegar straumurinn $\mathbf{j}$ rennur þvert á segulsviðið $\mathbf{B}$
- Gerum ráð fyrir sýnisbút þar sem rafsviðið E_x liggur eftir sýninu endilöngu og segulsviðið er hronrétt á rafsviðsstefnuna

Hreyfing í segulsviði: Hall hrif

- Ef straumur getur ekki runnið í $y-$stefnuna þá verður að setja $\delta v_y = 0$
- Þetta er einungis mögulegt ef það myndast þversum rafsvið

$$E_y = -\omega_c \tau E_x = \frac{eB\tau}{m} E_x$$

- Stærðin sem skilgreind er með

$$R_{\rm H} = \frac{E_y}{j_x B}$$

er nefnd **Hall stuðull**

Hreyfing í segulsviði: Hall hrif

- Til að finna Hall stuðulinn setjum við

$$j_x = \frac{ne^2\tau E_x}{m}$$

og fáum

$$R_{\mathrm{H}} = -\frac{eB\tau E_x/m}{ne^2\tau E_x B/m} = -\frac{1}{ne}$$

sem er neikvæð stærð fyrir frjálsar rafeindir

$\Longrightarrow$ Dæmi 8.2.

$\Longrightarrow$ Dæmi 8.3.

$\Longrightarrow$ Dæmi 8.4.

Varmaleiðni í málmum

- Áður höfum við séð að varmaleiðni er gefin með

$$\kappa = \frac{1}{3} C v \lambda$$

- Fyrir kúlulaga Fermiyfirborð og þegar τ er aðeins háð orku þá er varmaleiðni Fermi gass

$$\kappa_{\mathrm{el}} = \frac{1}{3} C v_{\mathrm{F}}^2 \tau(\mathcal{E}_{\mathrm{F}})$$

  þar sem meðalsnertan er

$$\lambda = v_{\mathrm{F}} \tau$$

Varmaleiðni í málmum

- Nú er

$$C \approx \frac{\pi^2}{2} n \frac{k_{\mathrm{B}}^2 T}{\mathcal{E}_{\mathrm{F}}} = \frac{\pi^2}{2} n k_{\mathrm{B}} \frac{T}{T_{\mathrm{F}}}$$

- Þetta gefur

$$\kappa_{\mathrm{el}} = \frac{\pi^2}{3} \frac{n k_{\mathrm{B}}^2 T}{m^* v_{\mathrm{F}}^2} v_{\mathrm{F}} \lambda = \frac{\pi^2 n k_{\mathrm{B}}^2 T \tau}{3 m^*}$$

þar sem

$$\mathcal{E}_{\mathrm{F}} = \frac{1}{2} m^* v_{\mathrm{F}}^2$$

Varmaleiðni í málmum

- Lögmál Wiedermann-Franz segir að hlutfall varmaleiðni málma og rafleiðni er í réttu hlutfalli við hitastig

$$\frac{\kappa}{\sigma} = \frac{\pi^2 n k_B^2 T \tau / 3m^*}{n e^2 \tau / m^*} = \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k_B}{e} \right)^2 T$$

- Lorentz talan er skilgreind

$$L \equiv \frac{\kappa}{\sigma T}$$

og ætti því að hafa gildið

$$L = \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k_B}{e} \right)^2 = 2.34 \times 10^{-8}$$

sem er óháð bæði n og m

Varmaleiðni í málmum

málmur	$L \times 10^8$ [W Ω/K^2]	$L \times 10^8$ [W Ω/K^2]
	0° C	100° C
Ag	2.31	2.37
Au	2.35	2.40
Cu	2.23	2.33
Pt	2.51	2.60

Frekari upplýsingar

- Þessi kafli er að mestu byggður á kafla 9 hjá Ibach and Lüth (2009). Sambærileg umfjöllun er á bls. 140 – 153 og Appendix F hjá Kittel (1986) og kafla 1 hjá Ashcroft and Mermin (1976). Um Drude líkanið er fjallað í kafla 3 hjá Simon (2013). Kafli 16 hjá Simon (2013) fjallar um hvernig þéttefni er skipt í málma, hálfleiðara og einangrara. Frumheimildin fyrir Drude líkaninu er Drude (1900a,b).

Heimildir

Ashcroft, N. W. and N. D. Mermin (1976). *Solid State Physics*. Philadelphia: Holt, Rinehart and Winston.

Drude, P. (1900a). Zur Elektronentheorie der Metalle. *Annalen der Physik 306*(3), 566–613.

Drude, P. (1900b). Zur Elektronentheorie der Metalle; II. Teil. Galvanomagnetische und thermomagnetische Effecte. *Annalen der Physik 308*(11), 369–402.

Ibach, H. and H. Lüth (2009). *Solid-State Physics: An Introduction to Principles of Materials Science* (4 ed.). Berlin Heidelberg: Springer Verlag.

Kittel, C. (1986). *Introduction to Solid State Physics* (6 ed.). New York: John Wiley & Sons.

Simon, S. H. (2013). *The Oxford Solid State Basics*. Oxford: Oxford University Press.