בשיעור הקודם הצגנו מודל קוונטי פשוט לתאור התרומה הפוננית למוליכות החום של גביש. נפנה כעת למודל דומה שהוצע ע"י Drude בסוף המאה ה 19 לתאור האופן בו נעים אלקטרונים בגביש. זוהי תחילתו של פרק שיעסוק בתכונות האלקטרונים החופשיים הקיימים במתכת. נתחיל במודל הקלאסי של Drude ונעבור בהמשך למודל קוונטי פשוט.

הנחות מודל Drude:

1. האלקטרונים עוברים התנגשויות (עם היונים, פוננים, אלקטרונים אחרים) בהסתברות $\frac{dt}{\tau}$ בפרק זמן dt. τ: mean free time או ה relaxation time. ההנחה כי τ אינו תלוי במקום ובמהירות.

2. ההתנגשויות רגעיות וכיוון תנועת האלקטרון לאחר ההתנגשות נקבע באופן אקראי לגמרי ללא קשר לכוון תנועתו לפני ההתנגשות.

3. בכל התנגשות האלקטרון מגיע לשווי משקל עם סביבתו ויוצא ממנה עם אנרגיה ממוצעת הנקבעת בהתאם לטמפרטורה המקומית בסביבת ההתנגשות.

4. בין התנגשויות האלקטרון נע בהשפעת שדות חיצוניים אם אלה מופעלים על הדגימה אך האינטראקציה בינו ובין שאר האלקטרונים והיונים אינן נלקחות בחשבון.

נדון במשוואת התנועה לתנע הממוצע של אלקטרון $\vec{P}(t)$: נרצה למצוא את $\vec{P}(t+dt)$

בהסתברות $\left(1-\frac{dt}{\tau}\right)$ האלקטרון לא יעבור התנגשות בזמן זה והתנע שלו יתפתח בהתאם למשוואת ניוטון: $\vec{P}(t)+\vec{F}(t)dt$

בהסתברות $\frac{dt}{\tau}$ הוא יעבור התנגשות ממנה יצא עם תנע ממוצע 0 (מכיון שהכוון אקראי) ויבצע בזמן dt תנע $\vec{F}(t)dt$ כאשר $\vec{F}$ הוא הכח החיצוני הפועל עליו.

$$\Rightarrow \vec{P}(t+dt)=\left(1-\frac{dt}{\tau}\right)\left(\vec{P}(t)+\vec{F}(t)dt\right)+\frac{dt}{\tau}\vec{F}dt$$

קיבלנו לכן עבור התנע הממוצע

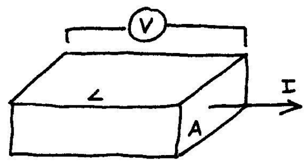
$$\frac{d\vec{P}}{dt} = \vec{F}(t) - \frac{1}{\tau}\vec{P}(t)$$

האיבר האחרון באגף הימני מתאר את דעיכת התנע הממוצע כתוצאה מההתנגשויות.
נשתמש במשוואה זו לחישוב מספר תכונות של גז האלקטרונים:

מוליכות DC

לפי חוק אוהם הזרם I העובר דרך דוגמא פרופורציוני למפל המתח עליה V כאשר R היא ההתנגדות החשמלית.

$$V = IR$$



אם הדוגמא באורך L ושטח חתך A
צפיפות הזרם היא $J = \frac{I}{A}$
והשדה החשמלי על הדוגמא $E = \frac{V}{L}$

נגדיר לכן את ההתנגדות הסגולית ρ כמקדם הפרופורציה בין E ו J

$$\vec{E} = \rho \vec{J}$$

$$R = \frac{\rho L}{A}$$

נגדיר את המוליכות החשמלית σ להיות $\sigma = \frac{1}{\rho}$ כך ש

$$\vec{J} = \sigma \vec{E}$$

צפיפות הזרם החשמלי בה n אלקטרונים ליחידת נפח נעים במהירות ממוצעת $\vec{v}$ היא:

$$\vec{J} = -en\vec{v}$$

סימנו ב $(-e)$ את מטען האלקטרון ו nv הוא מספר האלקטרונים החוצים את השטח A ליחידת זמן.

כדי למצוא את המהירות הממוצעת $\vec{v}$ נתבונן במשוואת התנועה לתנע הממוצע $\vec{P}$ ונניח מצב עמיד בו $\vec{P}$ לא משתנה בזמן: $\frac{d\vec{P}}{dt}=0$. מכיוון ש $\vec{F} = -e\vec{E}$ נקבל

$$\vec{v} = \frac{\vec{P}}{m} = -\frac{e\tau\vec{E}}{m}$$

$$\Rightarrow \vec{J} = \frac{ne^2\tau}{m}\vec{E} \quad \Rightarrow \quad \sigma = \frac{ne^2\tau}{m}$$

המוליכות נשלטת בעיקר ע"י τ השגת אינטואיציה על תלותו בטמפ' ומכאן גם לתלות המוליכות בטמפרטורה.
עבור מתכות בטמפרטורת החדר $\tau \sim 10^{-14}$ sec.

Drude הניח את מהירות האלקטרונים הממוצעת עפ"י משפט החלוקה השווה הקלאסי $\frac{1}{2}mv_0^2=\frac{3}{2}k_BT$
ונמצא $v_0 \sim 10^7 \frac{cm}{sec}$ בטמפרטורת החדר. הוא השתמש בזה כדי לקבל ש- l = mean free path
הוא מסדר גודל של 10Å. ערך זה התאים לתמונה שלו על כך שמקור הפיזור הינן ההתנגשויות בין
האלקטרונים ליונים.

למעשה נמצא כי v_0 (מהירות פרמי) אינה תלויה בטמפרטורה וגדולה בסדר גודל מההערכה אליה הגיע Drude
ובהתאם כך $l \sim 10^2-10^3\text{Å}$. נראה כי למעשה האלקטרון אינו מתפזר כלל מהיונים כל עוד הם מסודרים
באופן אידאלי בסריג אלא מפגמים בסדר זה.

מוליכות AC

נתאר את הזרם המושרה ע"י שדה חשמלי התלוי בזמן

$$\vec E(t)=Re\left[\vec E(\omega)e^{-i\omega t}\right]$$

משוואת התנועה לתנע הממוצע:

$$\frac{d\vec P}{dt}=-\frac{\vec P}{\tau}-e\vec E(t)$$

נציב פתרון מהצורה $\vec P(t)=Re\left[\vec P(\omega)e^{-i\omega t}\right]$ $\Leftarrow$

$$-i\omega\vec P(\omega)=-\frac{\vec P(\omega)}{\tau}-e\vec E(\omega)$$

צפיפות הזרם הינה $\vec J=-ne\frac{\vec P}{m}$ $\Leftarrow$

$$\vec J(t)=Re\left[\vec J(\omega)e^{-i\omega t}\right]$$

כאשר

$$\vec J(\omega)=-\frac{ne}{m}\vec P(\omega)=\underbrace{\frac{\sigma_0}{1-i\omega\tau}}_{\sigma(\omega)}\vec E(\omega)$$

עם $\sigma_0=\frac{ne^2\tau}{m}$ מוליכות ה-DC.

נהוג לכתוב את היחס בין $\vec J(\omega)$ ל-$\vec E(\omega)$ מוליכות AC: $\sigma(\omega)$

השימוש החשוב ביותר של תוצאה זו הוא בהקשר של התקדמות קרינה אלקטרומגנטית במתכת.
בנוכחות קרינה כזו יהיה קיים גם כוח מגנטי שיגרום להופעת האבר $-\frac{e}{c}\frac{\vec P}{m}\times\vec B$ במשוואת התנועה
ל-$\vec P$ אך הוא קטן בשיעור $\frac{v}{c}$ ביחס לאבר הנובע מהשדה החשמלי ולכן ניתן להזניחו.
אנו גם חישבנו את המוליכות עבור שדה הקבוע במרחב בעוד שבגל אלקטרומגנטי השדה משתנה במרחב.
במודל Drude הזרם בנקודה $\vec r$ נקבע לחלוטין ע"י מה שהשדה החשמלי עשה לכל אלקטרון המגיע
ל-$\vec r$ מאז ההתנגשות האחרונה שלו שהייתה במרחק ממוצע l. לכן כל עוד השדה משתנה
על פני מרחקים הגדולים בהרבה מ-l ניתן לחשב את הזרם ב-$\vec r$ ע"י ההנחה כי השדה
החשמלי קבוע בסביבה זו וניתן ע"י ערכו בנקודה:

אם $\lambda \gg l$:

$$\vec J(\vec r,\omega)=\sigma(\omega)\vec E(\vec r,\omega)$$

נניח כי זה המצב ונרשום את משוואות Maxwell:

$$\vec{\nabla}\times\vec{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}$$

$$\vec{\nabla}\times\vec{B} = \frac{4\pi}{c}\vec{J} + \frac{1}{c}\frac{\partial \vec{E}}{\partial t}$$

נניח כי הגל המתקדם בתוך המתכת הוא גל רוחבי $\vec{\nabla}\cdot\vec{E}=0$ כלומר אין משרה הצטברות מטען בדוגמא.
(מאוחר יותר נטפל בגלים אורכיים). תחת הנחה זו

$$\vec{\nabla}\times(\vec{\nabla}\times\vec{E}) = -\nabla^2\vec{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}(\vec{\nabla}\times\vec{B}) = -\frac{4\pi}{c^2}\frac{\partial}{\partial t}\vec{J} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\vec{E}}{\partial t^2}$$

$$\vec{E}(\vec{r},t) = \vec{E}(\vec{r},\omega)e^{-i\omega t}$$

$$\vec{J}(\vec{r},t) = \vec{J}(\vec{r},\omega)e^{-i\omega t} = \sigma(\omega)\vec{E}(\vec{r},\omega)e^{-i\omega t}$$

$$\Rightarrow \quad -\nabla^2\vec{E}(\vec{r},\omega) = \frac{\omega^2}{c^2}\underbrace{\left(1+\frac{4\pi i\sigma(\omega)}{\omega}\right)}_{\epsilon(\omega)}\vec{E}(\vec{r},\omega)$$

כאשר המקדם הדיאלקטרי המורכב הינו:

עבור תדירויות גבוהות מספיק כך ש $\omega\tau \gg 1$ נקבל

$$\epsilon(\omega) = 1-\left(\frac{\omega_p}{\omega}\right)^2$$

כאשר תדירות הפלסמה (נבין בהמשך מדוע היא נקראת כך) נתונה ע"י

$$\omega_p = \frac{4\pi n e^2}{m}$$

ההבדל מאד בין גל מתקדם עבור $\epsilon>0$ וגל דועך כאשר $\epsilon<0$: קרינה לא יכולה להתקדם במתכת.
לכן עבור $\omega>\omega_p$ אנו מצפים כי מתכות יהפכו שקופות לקרינה אלקטרומגנטית. במתכות האלקליות הדבר מתרחש בתחום העל-סגול.

תוצאה נוספת הקשורה להתנהגות האלקטרומגנטית של מתכות הוא קיומם של גלי מטען אורכיים: פלסמונים
גל אלקטרומגנטי אורכי ישרה צפיפות מטען ρ בדוגמא:

$$\vec{\nabla}\cdot\vec{E} = 4\pi\rho$$

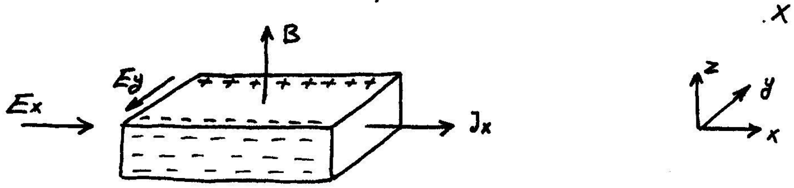
$$\vec{\nabla}\cdot\vec{J} = -\frac{\partial\rho}{\partial t}$$

כאשר צפיפות המטען וזרם המשרה קשורות ע"י משוואת הרציפות

$$\Rightarrow \frac{1}{\sigma(\omega)}\vec{\nabla}\vec{J}(\vec{r},\omega) = \frac{1}{\sigma(\omega)}i\omega\rho(\vec{r},\omega) = 4\pi\rho(\vec{r},\omega)$$

אפקט Hall

נתון גוש בו שדה חשמלי מקביל לאורך ציר x ושדה מגנטי לאורך ציר z:
בגוש זרם J_x הנע לאורך ציר x.



המטענים הנושאים הינם אלקטרונים. הם נעים בכיוון x השלילי (נהוג לסמן את כיוון J_x בכיוון נושאי המטען החיוביים). בעת תנועתם פועל על האלקטרונים כח לורנץ $-\frac{e}{c}\vec{V}\times\vec{B}$ הדוחף אותם בכיוון y השלילי. כתוצאה מכך הם מצטברים על שפה אחת של הגביש ומשאירים את השפה השניה טעונה חיובית. נוצר לכן שדה חשמלי בכיוון y השלילי. שדה זה פועל כח שמאזן בסופו של דבר את כח לורנץ.

נגדיר את ההתנגדות הסגולית האורכית (longitudinal resistivity)
$$\rho_{xx} = \frac{E_x}{J_x}$$

ואת התנגדות Hall (Hall resistivity)
$$\rho_{xy} = \frac{E_y}{J_x}$$

נהוג גם להגדיר את מקדם Hall (Hall coefficient)
$$R_H = \frac{\rho_{xy}}{B} = \frac{E_y}{BJ_x}$$

שים לב: מכיון ש $J_x>0$ ו E_y מכוון לכיוון y השלילי ולכן $E_y<0$ $(B=B_z>0)$
אנו מקבלים ש $R_H<0$ במקרה בו בדוגמא נושאי מטען שליליים.
אם הזרם נישא ע"י נושאי מטען חיוביים $J_x>0$ עדיין, אבל כח לורנץ ולכן גם E_y יהיו בעלי סימן הפוך לזה שמצאנו למעלה כלומר $E_y>0$ ונקבל לכן $R_H>0$.
⇐ סימנו של R_H משמש לסימון המטען של המטענים הנושאים.

נתונה משוואת התנועה למצב המתמיד:
$$\frac{d\vec{P}}{dt} = -e\left(\vec{E} + \frac{\vec{P}}{mc}\times\vec{B}\right) - \frac{\vec{P}}{\tau}$$

נפתור את המקרה הדומה $\frac{d\vec{P}}{dt}=0$ (נמצאים בשיווי):
$$0 = -eE_x - \omega_c P_y - \frac{P_x}{\tau}$$
$$0 = -eE_y + \omega_c P_x - \frac{P_y}{\tau}$$

כשהוגדרה את תדירות הציקלוטרון $\omega_c = \frac{eB}{mc}$: תדירות הסיבוב הקלאסית של אלקטרון בשדה מגנטי.

נכפיל את המשוואות ב $\frac{ne\tau}{m}$ - ונקבל

$$\sigma_0 E_x = \omega_c\tau J_y + J_x$$
$$\sigma_0 E_y = -\omega_c\tau J_x + J_y$$

כאשר $\sigma_0 = \frac{ne^2\tau}{m}$ היא מוליכות ה DC שמצאנו.
במצב העמיד אין זרם בכיוון y $\Leftarrow$ $J_y = 0$ ונקבל

$$J_x = \sigma_0 E_x$$
$$J_x = -\frac{\sigma_0}{\omega_c\tau} E_y$$

$$\Rightarrow \quad \rho_{xx} = \frac{1}{\sigma_0} \quad , \quad \rho_{xy} = -\frac{\omega_c\tau}{\sigma_0}$$

נשתמש בהגדרות σ_0 ו ω_c לקבל

$$R_H = -\frac{1}{nec}$$

אנו רואים לכן 2 במודל Drude:

1. המוליכות החשמלית אינה תלויה בשדה המגנטי.
2. ה Hall coefficient תלוי רק בצפיפות נושאי המטען (והסימן) ולא ב τ ולכן אנו מצפים שיהיה בלתי תלוי בטמפרטורה, והשדה המגנטי.

למעשה שתי התוצאות אלה אינן נכונות בחלק גדול מהמקרים ויש לעבור לטיפול קוונטי כדי להבין את הסטיות מהתוצאות מודל Drude. בפרט R_H יכול לשנות סימנו כפונקציה של הטמפרטורה והשדה המגנטי. יחד עם זאת בטמפרטורות נמוכות מאוד הוא בדרך כלל שואף לערך הנתון במודל Drude ולכן מהווה אמצעי למדידת ריכוז נושאי המטען בדוגמא.

מוליכות חום -

מוליכות החום האלקטרונית מחושבת בעזרת מודל Drude באופן אנלוגי לחלוטין לדרך בה חישבנו את מוליכות החום ופונונים כאשר τ הוא כאן ה mean free time האלקטרוני, $v \to c$ ו C_v הוא התרומה האלקטרונית לקיבול החום הסגולי של הדוגמא:

$$K = \frac{1}{3} C_v v^2 \tau$$

נבחון היחס בין מוליכות החום האלקטרונית ומוליכות החשמלית

$$\frac{\kappa}{\sigma} = \frac{\frac{1}{3} C_v v^2 \tau}{\frac{ne^2\tau}{m}} = \frac{1}{3}\frac{C_v m v^2}{ne^2}$$

כפי שראינו בטיפול הקוונטי בגז האלקטרונים קיבול החום הסגולי הינו מאוד $\left(T \ll 10^4 K\right)$ $\sim T$ והמהירות האופיינית שלהם היא $v_F \sim 10^8 \frac{cm}{sec}$ מהירות פרמי שאינה תלויה בטמפרטורה. נציב כי במקרה זה נקבל

<u>חוק Wiedemann - Franz:</u>

$$\frac{\kappa}{\sigma} = \frac{\pi^2}{3}\left(\frac{k_B}{e}\right)^2 T$$

כאשר Drude הציג את המודל שלו מכניקת הקוונטים עדיין הייתה רחוקה כ-30 שנה קדימה. הוא העריך את קיבול החום הסגולי של האלקטרונים מתוך התוצאה הקלאסית $C_v = \frac{3}{2} n k_B$ ואת האנרגיה הקינטית הממוצעת שלהם $\frac{1}{2} m v^2 = \frac{3}{2} k_B T$ באופן דומה. הוא קיבל לכן $\frac{\kappa}{\sigma} = \frac{3}{2}\left(\frac{k_B}{e}\right)^2 T$ תוצאה הקרובה מאוד לתוצאה הקוונטית ולמעשה שנמצאה על ידי Wiedemann ו Franz באותה תקופה. ההתאמה נחשבה להישג גדול של המודל אך כפי שאנו רואים הן תוצאות מקרה לגמרי. Drude העריך את קיבול החום הסגולי בקירוב את המהירות הממוצעת האלקטרונית בחום טמפרטורה (כשהתוצאה הקלאסית בטמפרטורת החדר נותן ערך הגדול ב-100 מהערך הקוונטי). שני הטעויות קיזזו זו את זו לכן התוצאה התקרבה לתוצאה הקוונטית.