מודל Drude הינו מודל קינטי לחלקיקים קלאסיים. הנחנו בו לצורך כך כי האנרגיה הקינטית הממוצעת של האלקטרונים נתונה ע"י משפט החלוקה השווה להיות $\frac{3}{2}k_BT$ לכל אלקטרון עם תרומה של $\frac{3}{2}k_B$ לחום הסגולי. כבר בימיו של Drude הוא ידע כי אין זה המצב. הפתרון הגיע עם פיתוח תורת הקוונטים וגילוי עקרון האיסור של Pauli. האלקטרונים הינם פרמיונים המצייתים לסטטיסטיקת פרמי-דירק. לתופעה זו השלכות מרחיקות לכת על תכונות של האלקטרונים. נבחן כעת השלכות אלה.

נתבונן בגז אלקטרונים חופשיים - ללא אינטראקציות הנמצא בקופסא במימדים L_x, L_y, L_z כשתנאי שפה מחזוריים על שפת הקופסא. פונקצית הגל הינה לכן:

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \qquad k_\mu = \frac{2\pi}{L_\mu} n \qquad n = 0, \pm1, \pm2$$

$$\mu = x, y, z$$

עם אנרגיה:

$$\mathcal{E}(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \qquad \left(k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2\right)$$

מצב היסוד של מערכת בת N אלקטרונים הינו המצב בו האלקטרונים מאכלסים את N המצבים השונים הנמוכים ביותר באנרגיה. במרחב k מצבים אלה יהיו המצבים המתאימים לערכי k הממוקמים בתוך כדור ברדיוס k_F (Fermi wave vector). k_F נתון ע"י התנאי:

נפח הכדור

$$2 \cdot \frac{\frac{4}{3}\pi k_F^3}{\frac{(2\pi)^3}{V}} = N \quad \Rightarrow \quad n = \frac{N}{V} = \frac{k_F^3}{3\pi^2}$$

ניתן לשים שני אלקטרונים עם ספין הפוך בכל מצב k

נפח התא האלמנטרי המוקצה לכל מצב מותר

עבור מתכות שבהן $n \sim 10^{22}\,cm^{-3}$ $k_F \sim 1\,\mathring{A}^{-1}$

מהירות פרמי (Fermi velocity) מוגדרת כ:

$$v_F = \frac{\hbar k_F}{m}$$

במתכות $v_F \sim 10^8 \frac{cm}{sec}$ כמאית ממהירות האור!
שאלה: בכמה גדולה מהירות חלקיק קלאסי בטמפרטורת החדר.

אנרגית פרמי (Fermi energy) מוגדרת כ:

$$\mathcal{E}_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$$

ועבור מתכות $\mathcal{E}_F \sim 1\text{-}10\ eV$.

אנרגיית פרמי היא האנרגיה של המצב האנרגטי הגבוה ביותר המאוכלס כאשר $T=0$. ויש גם נוסחה
לאנרגיה הממוצעת של אלקטרון בגז מנוון:

$$E = \overset{\text{ספין}}{2}\sum_{\substack{\vec{k}\text{ inside}\\ \text{Fermi ball}}} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \longrightarrow \frac{2\cdot V}{(2\pi)^3}\int_{\substack{\vec{k}\text{ inside}\\ \text{Fermi ball}}} d^3k\, \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Rightarrow \frac{E}{V} = \frac{1}{\pi^2}\frac{\hbar^2 k_F^5}{10m}$$

האנרגיה הממוצעת לאלקטרון היא לכן

$$\frac{E}{N} = \frac{E}{V}\cdot\frac{1}{n} = \frac{3}{5}\varepsilon_F$$

נהוג גם להגדיר את טמפרטורת פרמי (Fermi temperature)
במתכות $T_F \sim 10^4 - 10^5\,K$

$$T_F = \frac{\varepsilon_F}{k_B}$$

כאשר האלקטרונים מתוארים על ידי סטטיסטיקת פרמי-דיראק האכלוס הממוצע של רמה עם
אנרגיה ε היא

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1}, \quad \beta = \frac{1}{k_B T}$$

כאשר μ: הפוטנציאל הכימי נקבע מהתנאי

$$N = \overset{\text{ספין}}{2}\sum_{\vec{k}} f(\varepsilon(\vec{k}))$$

$$\Rightarrow n = \int \frac{d^3k}{4\pi^3} f(\varepsilon(\vec{k}))$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon\, g(\varepsilon)\, f(\varepsilon)$$

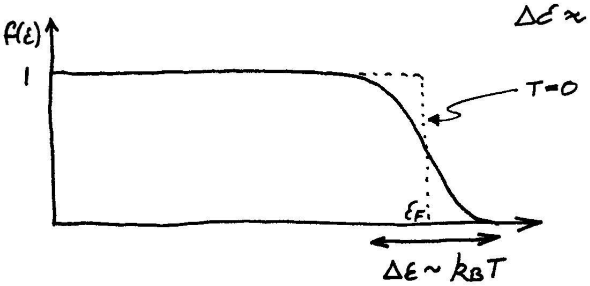
כעת נוח לעבור מאינטגרציה על k לאינטגרציה על האנרגיה
בעזרת צפיפות המצבים ליחידת נפח

$$g(\varepsilon) = 2\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\,\delta(\varepsilon - \varepsilon(\vec{k}))$$

$$= \frac{1}{4\pi^3}\cdot 4\pi \int_0^{\infty} dk\, k^2\, \delta\left(\varepsilon - \frac{\hbar^2}{2m}k^2\right)$$

$$= \frac{m}{\pi^2\hbar^2}\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}\varepsilon}\cdot\begin{cases} 1 & \varepsilon > 0 \\ 0 & \varepsilon < 0 \end{cases}$$

נתבונן ב $f(\varepsilon)$. ב $T=0$ זוהי פונקצית מדרגה עם $\varepsilon=\varepsilon_F$.
ב $T\neq 0$ שפת המדרגה מרוחה על פני אזור $\Delta\varepsilon \approx k_BT$



כאשר נרצה לחשב אינטגרל מהצורה

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon\, g(\varepsilon) f(\varepsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon\, G(\varepsilon)\left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon}\right)$$

נבצע אינטגרציה בחלקים תוך שימוש בהגדרה

$$G(\varepsilon) = \int_{-\infty}^{\varepsilon} d\varepsilon'\, g(\varepsilon')$$

$$G(-\infty)=0\ , \quad f(\infty)=0$$

$-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon}$ – היא פונקציה המרוכזת סביב $\varepsilon=\mu$ (ברוחב $\Delta\varepsilon\sim k_BT$) רק שאם $G(\varepsilon)$
אינו משתנה באופן פתאומי בסביבה Δ נוכל לפתח סביב $\varepsilon=\mu$

$$G(\varepsilon) = G(\mu) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\varepsilon-\mu)^n}{n!} \frac{d^n G}{d\varepsilon^n}\Big|_{\varepsilon=\mu}$$

נשתמש בכך ש $\int_{-\infty}^{\infty} -\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} d\varepsilon = 1$, $G(\mu)=\int_{-\infty}^{\mu} d\varepsilon\, g(\varepsilon)$ ובכך ש $-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon}$ היא פונקציה
זוגית ב $\varepsilon-\mu$ כך שבאינטגרל ישרדו רק האיברים הזוגיים ונקבל את התוצאה:

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon\, g(\varepsilon) f(\varepsilon) = \int_{-\infty}^{\mu} g(\varepsilon)\, d\varepsilon + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n)!} \frac{d^{2n-1} g(\varepsilon)}{d\varepsilon^{2n-1}}\Big|_{\varepsilon=\mu} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon\, (\varepsilon-\mu)^{2n}\left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon}\right)}_{\text{מסדר גודל } (k_BT)^{2n}}$$

פיתוח זה נקרא: Sommerfeld expansion נשתמש בו לחישוב μ:

$$n = \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon\, g(\varepsilon) f(\varepsilon) = \int_{-\infty}^{\mu} d\varepsilon\, g(\varepsilon) + \frac{\pi^2}{6} (k_BT)^2 \frac{dg}{d\varepsilon}\Big|_{\varepsilon=\mu} + O(k_BT)^4$$

$$\int^{\varepsilon_F} d\varepsilon\, g(\varepsilon)$$

עבור $\varepsilon_F \gg k_BT$

$$\Rightarrow \int_{\varepsilon_F}^{\mu} d\varepsilon\, g(\varepsilon) = -\frac{\pi^2}{6}(k_BT)^2 \left.\frac{dg}{d\varepsilon}\right|_{\varepsilon=\mu} + O(k_BT)^4$$

$$\Rightarrow \int_{\varepsilon_F}^{\mu} d\varepsilon \sqrt{\varepsilon} = -\frac{\pi^2}{12}(k_BT)^2 \frac{1}{\sqrt{\mu}} + O(k_BT)^4$$

$$\Rightarrow \frac{2}{3}\sqrt{\mu}\left(\mu^{3/2} - \varepsilon_F^{3/2}\right) = -\frac{\pi^2}{12}(k_BT)^2 + O(k_BT)^4$$

כשהפתרון הוא מהצורה

$$\mu = \varepsilon_F\left[1 - a\left(\frac{k_BT}{\varepsilon_F}\right)^2 + O\left(\frac{k_BT}{\varepsilon_F}\right)^4\right]$$

$$\frac{2}{3}\left(\mu^2 - \varepsilon_F^{3/2}\sqrt{\mu}\right) \simeq \frac{2}{3}\varepsilon_F^2\left[1 - 2a\left(\frac{k_BT}{\varepsilon_F}\right)^2 - 1 + \frac{a}{2}\left(\frac{k_BT}{\varepsilon_F}\right)^2\right] \Rightarrow a = \frac{\pi^2}{12}$$

$$\Leftarrow \quad \mu = \varepsilon_F\left[1 - \frac{\pi^2}{12}\left(\frac{k_BT}{\varepsilon_F}\right)^2 + O\left(\frac{k_BT}{\varepsilon_F}\right)^4\right]$$

מכיון שבמתכות $\varepsilon_F \sim 10^4 - 10^5 K$ לכל צורך מעשי $\mu = \varepsilon_F$ בטמפרטורת החדר.

נעבור לאנרגיה בצורה דומה כדי לחשב את האנרגיה הממוצעת ליחידת נפח $u = \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon\, g(\varepsilon)\varepsilon f(\varepsilon)$

$$= \int_0^{\mu} d\varepsilon\, \varepsilon g(\varepsilon) + \frac{\pi^2}{6}(k_BT)^2\left[\mu g'(\mu) + g(\mu)\right] + O(k_BT)^4$$

$$\simeq u_0 + \frac{\pi^2}{6}(k_BT)^2 g(\varepsilon_F)$$

כאשר u_0 צפיפות האנרגיה במצב היסוד. $\left(u_0 = \frac{3}{5} n \varepsilon_F\right)$

ומכאן תרומת האלקטרונים לחום הסגולי היא

$$C_v = \left(\frac{\partial u}{\partial T}\right)_n = \frac{\pi^2}{3} k_B^2 g(\varepsilon_F) \cdot T = \frac{\pi^2}{2}\frac{n}{\varepsilon_F} k_B^2 T$$

אם נשלב עם התרומה הפוננים שמצאנו קודם לתרומת האלקטרונים אז נמצא כי קיבול החום הסגולי במתכות נתון ע"י

$$C_v = \gamma T + A T^3$$

כאשר התרומה האלקטרונית הופכת להיות דומיננטית בטמפרטורות נמוכות הקטנות ממספר מעלות K.

Sommerfeld הכליל את מודל Drude בכך שהמשיך לתאר את האלקטרונים כחלקיקים אבל
הנתונים לתיאור סמי-קלאסי אך נשלטים על ידי סטטיסטיקת פרמי-דיראק ולא סטטיסטיקת בולצמן
קלאסית.
בפרט מצבים המלאים המשמעות של התנועה של רב האלקטרונים אינם מעורבים אותו. כל זוג
עירורים אלה נעשים במינימום (מתח, שדה טמפרטורה קטנים) אינו מסוגל לעורר בגלל עקרון פאולי
רק את האלקטרונים ליד ϵ_F — אנו יוצרים זוגות אלקטרון-חור בו אלקטרון מועבר למעלה מעל
ϵ_F ובמקומו חור מתחת ל-ϵ_F. האלקטרונים הרלוונטיים לתכונות התובלה באזור העירורים
הקטנים (linear response) הינם האלקטרונים ליד ϵ_F לכן $k \approx k_F$ / $v \approx v_F$.
כדי שנוכל לדבר שוב חבילות גל המתארות כחלק או יותר כחלקיקים קלאסיים צריך התנע
והמקום נתונים בו זמנית. כדי לדבר שיהיה חבילות הגלים מוגדרת התנע ΔP יקיים
$\Delta P \ll P_F$ (רק שיש משמעות לדבר על תנע מוגדר כחלק או יותר)

אבל מעקרון אי הוודאות נקבל אז
$$\Delta x \sim \frac{\hbar}{\Delta P} \gg \frac{1}{k_F}$$

כלומר חבילות הגלים הינן בגודל גדול מ-k_F^{-1} שהוא גם מסדר גודל של המרחק בין אלקטרונים.
התיאור יהיה סביר לכן כל עוד נבדוק את השדות שבהם הפוטנציאל המשתנה על פני אורכי גל λ
הגדולים בהרבה מ-k_F^{-1} וכל עוד ה-ℓ (mean free path) גדול בהרבה מ-k_F^{-1}
כדי שנוכל לדבר על חלקיקים המפוזרים כשבין הפיזורים הם נעים כחלקיקים קלאסיים $\Rightarrow$
נדרוש

$$\lambda \gg k_F^{-1}\ , \quad \ell \gg k_F^{-1}$$

נחזור לבדוק את חוק Wiedemann-Franz. ראינו כי במסגרת מודל Drude

$$\frac{\kappa}{\sigma} = \frac{1}{3}\frac{C_v m v^2}{n e^2}$$

נשתמש בקיבול החום הסגולי של האלקטרונים הקוונטי שמצאנו
ומכיון, כפי שהסברנו, האלקטרונים המשתתפים בהולכת החום
הם אלה הנמצאים ליד ϵ_F ניקח
לשקול

$$C_v = \frac{\pi^2}{2}\frac{n}{\epsilon_F} k_B^2 T$$

$$v = v_F$$

$$\frac{\kappa}{\sigma} = \underbrace{\frac{\pi^2}{3}\left(\frac{k_B}{e}\right)^2}_{\text{Lorenz number}} T$$