מטרתנו בקורס זה היא להבין כיצד תכונותיהן של מערכות אלקטרוניות רב-חלקיקיות מושפעות מהיותם של האלקטרונים חלקיקים הנשלטים על ידי חוקי מכניקת הקוונטים. הקורס יכלול הצגה של הטכניקות העיקריות לטיפול קוונטי במערכות רב חלקיקיות ויוצג יישומן של טכניקות אלה במספר מקרים תוך שימת דגש על תכונות ההולכה של המערכות האלקטרוניות.

כדי להדגיש את התפקיד של מכניקת הקוונטים בקביעת תכונות מערכות מהסוג הנ"ל נערוך סקירה קצרה של המודל הקלאסי הפשוט ביותר לתאור הולכה אלקטרונית:

מודל Drude

בסוף המאה ה 19 התגלה האלקטרון על ידי תומפסון (1897) ושלוש שנים מאוחר יותר (1900) הציע דרודה את המודל הקינטי הבא לתאור הולכה בו אלקטרונים נעים בתוך גביש.

הנחות המודל:

1. האלקטרונים עוברים התנגשויות (דרודה האמין כי ההתנגשויות הינן עם יוני הסריג, נראה כי למעשה אין הדבר כך) בהסתברות $\frac{dt}{\tau}$ בפרק זמן dt.
τ: mean free time ההנחה היא כי τ אינו תלוי במקום ובמהירות.

2. ההתנגשויות רגעיות וכיוון תנועת האלקטרון לאחר ההתנגשות מפולג באופן אקראי ואחיד ללא קשר לכיוון תנועתו לפני ההתנגשות.

3. בין ההתנגשויות האלקטרון נע בהשפעת שדות חיצוניים, אם כאלה מופעלים, אך האינטראקציות בינו לבין שאר האלקטרונים והיונים אינן נלקחות בחשבון.

4. בעת ההתנגשות האלקטרון מגיע לשיווי משקל עם סביבתו ויוצא ממנה עם אנרגיה ממוצעת הנקבעת בהתאם לטמפרטורה המקומית בסביבת ההתנגשות.

נראה כיצד הנחות 1-3 מאפשרות לנו לחשב את המוליכות החשמלית (הנחה 4 נדרשת לשם חישוב מוליכות החום האלקטרונית).

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

בהסתברות $\left(1-\frac{dt}{\tau}\right)$ האלקטרון לא יעבור התנגשות בזמן זה והתנע שלו יקבע לפי משוואת התנועה של ניוטון: $\vec{P}(t)+\vec{F}(t)\,dt$ כאשר $\vec{F}(t)$ הוא הכח החיצוני

בהסתברות $\frac{dt}{\tau}$ האלקטרון יעבור התנגשות ממנה יצא עם תנע ממוצע 0 (מכיוון שהכיוון אקראי) ויירכוש בזמן dt תנע $\vec{F}(t)dt$

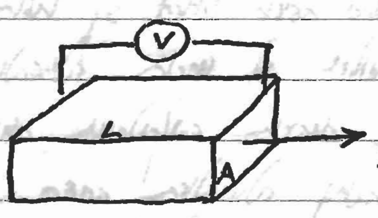
$$\Rightarrow \vec{P}(t+dt)=\left(1-\frac{dt}{\tau}\right)\left(\vec{P}(t)+\vec{F}(t)dt\right)+\frac{dt}{\tau}\vec{F}(t)\,dt$$

וקיבלנו קשר עבור התנע הממוצע

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

הביטוי האחרון מתאר את דעיכת התנע הממוצע כתוצאה מהתנגשויות.
נשתמש במשוואה זו לחישוב מספר תכונות של גז האלקטרונים:

<u>מוליכות DC</u>



לפי חוק אוהם הזרם I דרך הדגימה פרופורציוני למפל המתח עליה V : $V=IR$

אם הדגימה באורך L ושטח חתך A צפיפות הזרם היא $J=\frac{I}{A}$

והשדה החשמלי על הדגימה (בכיוון לאורך ציר X) $E=\frac{V}{L}$

נגדיר לכן את ההתנגדות הסגולית ρ (resistivity) כמקדם הפרופורציה בין E ו-J:

$$\vec{E} = \rho \vec{J} \qquad \Rightarrow R = \frac{L}{A}\rho$$

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

באופן כללי ρ ו-σ טנזורים. $E_\alpha = \rho_{\alpha\beta} J_\beta$, $J_\alpha = \sigma_{\alpha\beta} E_\beta$

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

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

סימנו ב-$(-e)$ את מטען האלקטרון

ו-nv הוא מספר האלקטרונים העוברים את A ליחידת זמן

כדי למצוא את המהירות הממוצעת $\vec{v}$ נבחן במשוואת התנועה לתנע הממוצע $\vec{P}$ ובמצב עומד בו $\vec{P}$ לא משתנה בזמן: $\frac{d\vec{P}}{dt} = 0$ מכיון שאצלנו $\vec{F} = -e\vec{E}$ נקבל

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

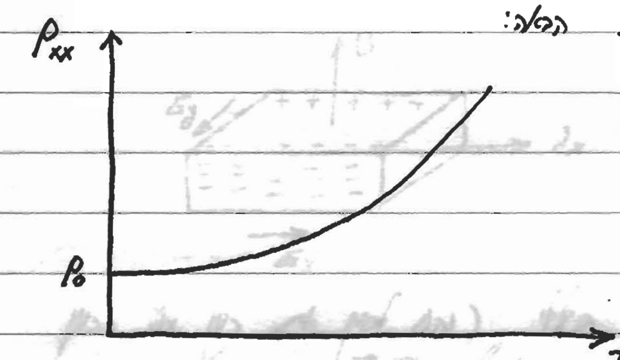
$$\vec{J} = \frac{ne^2\tau}{m}\vec{E} \qquad \Longrightarrow \qquad \sigma = \frac{ne^2\tau}{m}$$

המוליכות נשלטת בעיקר על ידי τ המכיל אינפורמציה על תהליכי הפיזור ומכאן גם תלות המוליכות בטמפרטורה. מתוך המדידות המוליכות לערכי מוליכות של מתכות בטמפרטורת החדר קבלו בערך $\tau \sim 10^{-14}\,sec$. הוא הניח את המהירות האלקטרונים הממוצעת מתוך משפט החלוקה השווה הקלאסי $\frac{1}{2}mv_0^2 = \frac{3}{2}k_BT$ הנותן בטמפרטורת החדר $v_0 \sim 10^7 \frac{cm}{sec}$ ומכאן $v_0\tau = l =$ mean free path מסדר גודל של $10\,\text{Å}$ ערך זה התאים לפרשנות שלו של כך שמקור הפיזור הינן התנגשויות בין אלקטרונים ליונים

למעשה נראה כי האלקטרונים אינם מפוזרים כלל מהשריג היוני ומסדר גודל מתבטאים בסדר זה. גם v_0 אינו מתאים לתיאור הקלאסי ויש בערך גודל שגוי על ידי

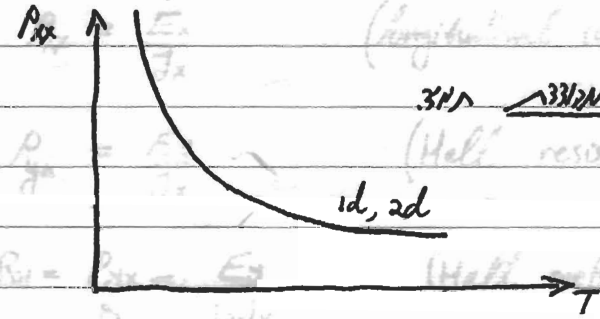
מוליכות בחומר שאינו חלש בטמפרטורה (עבור $T \lesssim 10^4 K$) וגדלה בסדר גודל מהמרחב בגלל דרודה ובהקטנות רק $l \sim 10^2 - 10^3 \mathring{A}$.

מתוך מודל דרודה אנו אף מצפים להתנהגות הבאה:



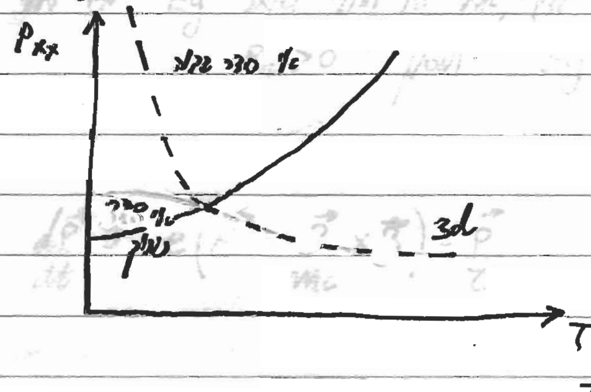
$$\rho = \rho_0 + AT^\alpha$$

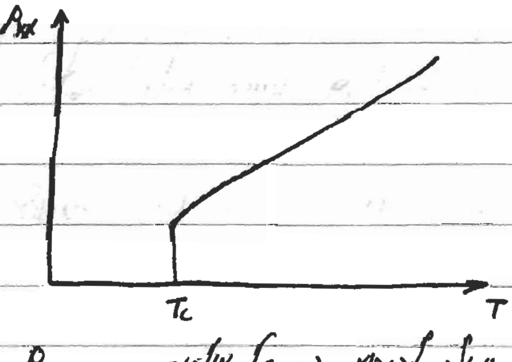
בטמפרטורות נמוכות ההתנהגות נשלטת על ידי פיזור מאי סדר ושואפת לערך אסימפטוטי ρ_0. (הגדלה עם כמות האי סדר)
בטמפרטורות גבוהות יותר מתווספים תהליכי פיזור מפונונים ואלקטרונים אחרים.
חישוב <u>קוונטי</u> של קצבי פיזור אלה מוביל ל $\alpha = 1$ עבור פיזור אלקטרון-אלקטרון ו $\alpha = 3$ עבור פיזור מפונונים.



בפועל בדגימות חד ודו ממדיות מתקבל:
ρ גדלה ללא גבול כאשר $T \to 0$ <u>המערכת מבודדת</u> תמיד.
(נסיונות מודרניים העלו רעיון על אפשרות שבדגמי מימד 2 $\rho \to \rho_0$ ב $T \to 0$ כנראה כתוצאה מאפקטים של אינטראקציות)

בשלושה ממדים ההתנהגות המקורית צפויה לשאוף לערך קבוע סופי כמו שמתקבל ממודל דרודה אבל עם הגדלת רמת האי סדר מעבר לערך קריטי המערכת עוברת "מעבר מוליך-מבודד" ו $\rho \to \infty$ כאשר $T \to 0$

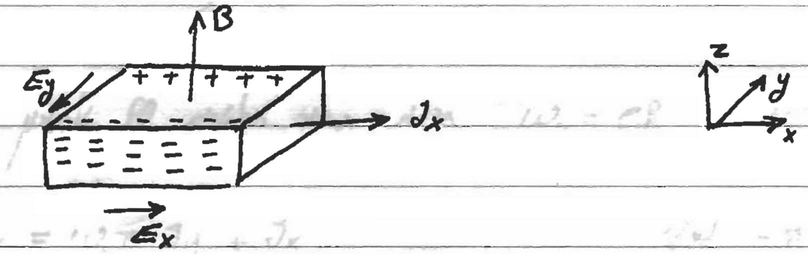




ובמוליכי על מתקיים גם על מוליכות: $\rho_{xx} = 0$ עבור $T < T_c$.

אפקט Hall

נדון במצב בו שדה חשמלי מופעל לאורך ציר X ושדה מגנטי לאורך ציר Z



המטענים הנושאים הינם אלקטרונים. הם נעים בכיוון X השלילי (נהוג לסמן את כיוון J_x בכיוון תנועת המטענים החיוביים) בגלל השדה המגנטי פועל עליהם כח לורנץ $-\frac{e}{c}\vec{v}\times\vec{B}$ הדוחף אותם בכיוון y השלילי. כתוצאה מכך הם מצטברים על שפה אחת של הדגמה ומשאירים את השפה השניה טעונה חיובית. מתפתח לכן שדה חשמלי בכיוון y השלילי. שדה זה מפעיל כח שמאזן בסופו של דבר את כח לורנץ.

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

ואת ההתנגדות הסגולית Hall (Hall resistivity)
$$\rho_{yx} = \frac{E_y}{J_x}$$

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

שים לב: מכיוון ש $J_x>0$! E_y מכוון לכיוון y השלילי ולכן $E_y<0$ $(B=B_z>0)$
אנו מקבלים ש $R_H<0$ במקרה בו נושאי המטען בדוגמא הם שליליים.
אם הזרם נישא ע"י נושאי מטען חיוביים $J_x>0$ עדיין, אבל כח לורנץ ואיתו E_y יהיו בעלי סימן הפוך לזה שמצאנו קודם לכן כלומר $E_y>0$ ומכאן $R_H>0$.
← סימנו של R_H מעיד לסוג המטענים הנושאים.

נדון במשוואת התנועה לגבי המודל
$$\frac{d\vec{P}}{dt} = -e\left(\vec{E} + \frac{\vec{P}}{mc}\times\vec{B}\right) - \frac{\vec{P}}{\tau}$$

נבחן את המשוואה במצב $\frac{d\vec{p}}{dt}=0$ ונקבל ברכיבים $0 = -eE_x - \omega_c p_y - \frac{p_x}{\tau}$

$$0 = -eE_y + \omega_c p_x - \frac{p_y}{\tau}$$

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

נכפיל ונשתמש ב $-\frac{ne\tau}{m}$ לקבל $\sigma_0 E_x = \omega_c \tau J_y + J_x$

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

כאשר $\sigma_0 = \frac{ne^2\tau}{m}$ היא מוליכות DC של דרודה אותה מצאנו קודם לכן.

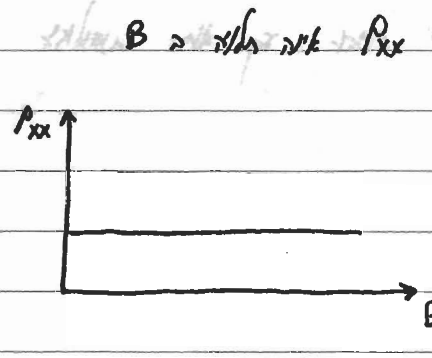
במצב שבו אין זרם בכיוון y $\Leftarrow$ $J_y = 0$ ונקבל $J_x = \sigma_0 E_x$

$$J_y = -\frac{\sigma_0}{\omega_c \tau} E_y$$

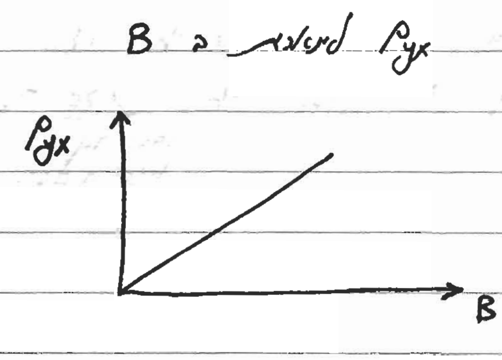
$$\Rightarrow \rho_{xx} = \frac{1}{\sigma_0} \quad , \quad \rho_{yx} = -\frac{\omega_c \tau}{\sigma_0} \quad , \quad R_H = -\frac{1}{nec}$$

קיבלנו לכן במסגרת מודל דרודה:

ρ_{xx} אינה תלויה ב B

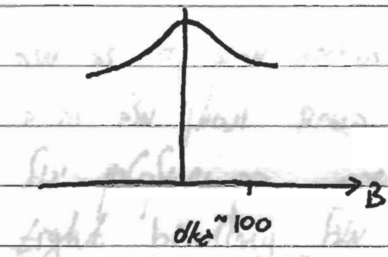


ρ_{yx} לינארית ב B



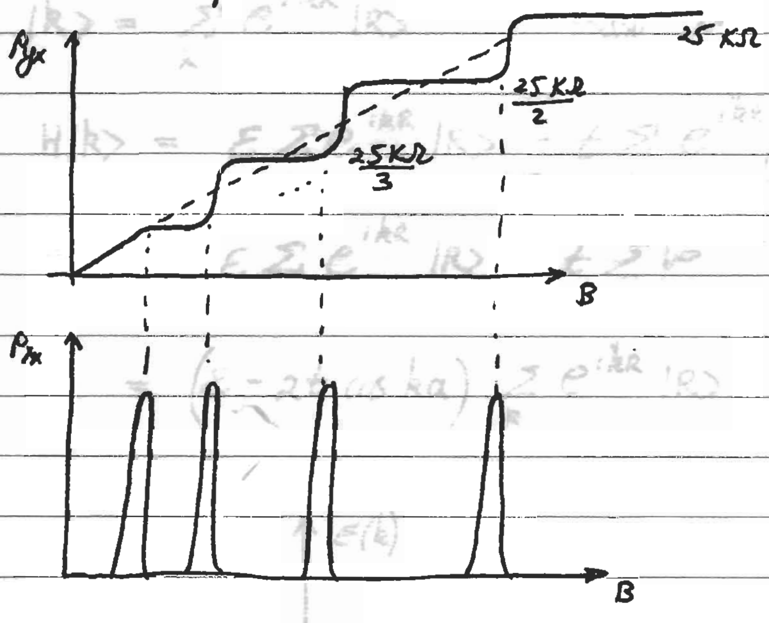
! R_H תלוי רק בצפיפות נושאי המטען (ובסימנם) ולא ב τ ולכן אנו מצפים שגם יהיה בלתי תלוי בטמפרטורה ובשדה המגנטי. בפועל קיימות מתכות בהן $R_H>0$ והזרם נראה כאילו (הוא) נישא על ידי מטענים חיוביים. מי הם?

למעשה בשדות מגנטים חלשים ρ_{xx} קטן עם גודל השדה (השדה המגנטי גורם להרס אפקטים של לוקליזציה - לוקליזציה חלשה)



נראה כי התופעה נובעת מאפקט אינטרפרנציה קוונטית

בשדות מגנטים חזקים של מספר טסלה - 10^4 גאוס נצפה אפקט הול הקוונטי: ρ_{xx} נעלמת ו ρ_{yx} מקוונטת בהצגת אוניברסליות עבור ערכי B מסוימים.



$$\rho_{yx} = \frac{h/e^2}{\text{integer}} \simeq \frac{25\,K\Omega}{\text{integer}}$$

עד כדי דיוק עפ״י של 10^{-10}

כאשר בשדות מגנטים חזקים עוד יותר נצפה אפקט הול הקוונטי השבור רק אותה התנהגות של ρ_{xx} ו ρ_H התנהגות עבור $\rho_{yx} \simeq \frac{25\,K\Omega}{\text{שבר עם מונה אי-זוגי.}}$

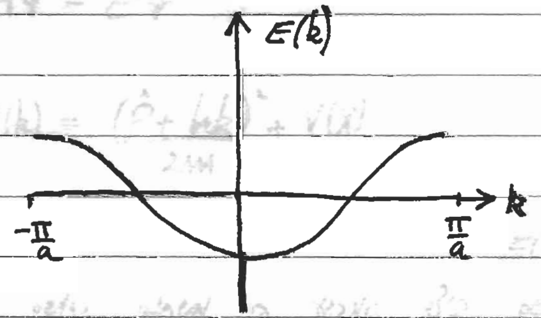
נראה כעת מודל אלקטרונים הנעים בפוטנציאל שבנוי מאזורי אטום מחוברים ממש

נתבונן בשרשרת חד מימדית המורכבת מ N אטומים הרחוקים מרחק a זה מזה
נניח כי האלקטרון יכול להמצא באורביטל סביב היון באתר ה-R ונסמן מצב זה ב $|R\rangle$
נניח כי קיימת חפיפה בין אורביטלים של יונים שכנים בשרשרת כך שהאלקטרון יכול
לבצע hopping בין אטומים שכנים. ההמילטוניאן של מודל __tight binding__
זה הינו

$$H=\sum_R \varepsilon |R\rangle\langle R| - t\sum_R\Big[|R-a\rangle\langle R| + |R+a\rangle\langle R|\Big]$$

המצב העצמי של ההמילטוניאן זה הינו מהצורה
$$|k\rangle = \sum_R e^{ikR}|R\rangle$$

נבדוק:
$$H|k\rangle = \varepsilon\sum_R e^{ikR}|R\rangle - t\sum_R e^{ikR}\big(|R-a\rangle+|R+a\rangle\big)$$
$$= \varepsilon\sum_R e^{ikR}|R\rangle - t\sum_R\Big[e^{ik(R+a)}+e^{ik(R-a)}\Big]|R\rangle$$
$$= \big(\varepsilon - 2t\cos ka\big)\sum_R e^{ikR}|R\rangle = E(k)\,|k\rangle$$



שים לב:

1. פונקציות הגל שפותרות מקיימות את משפט בלוך המבטא שפונקציות הגל של
הנעות בפוטנציאל מחזורי $V(x+a)=V(x)$ מקיימות

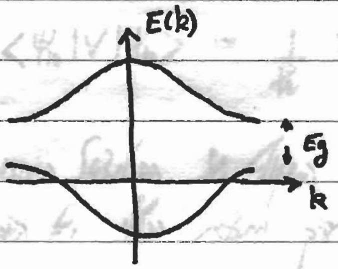
$$\psi(x) = e^{ikx}u_k(x)\quad,\quad u_k(x+a)=u_k(x)$$

אצלנו $u(x)=\sum_R \delta(x-R)$

2. k ה"crystal momentum" ת"ו ב 1^{st} BZ $\left[-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\right]$ מכיוון ש $|k\rangle = |k+\frac{2\pi}{a}\cdot n\rangle$

עבור תנאי שפה מחזוריים $n = -\frac{N}{2} \dots \frac{N}{2}$, $k = \frac{2\pi}{Na}\cdot n$

3. ההבדל יותר משמעותי אבל לכל אחד או עבור מודל כל האלקטרונים שחופשיים מפוטנציאל מחזורי כלל כמו שראינו ה nearly free electron model שאומר שאם מכניסים בהשפעת הספקטרום מורכב ממספר פסי אנרגיה המופרדים זה מזה בפערי אנרגיה energy gaps



במוליכים כמו שרואים אנרגיית פרמי נמצאת בתוך פס
שונהסם במבודדים ובמוליכים למחצה E_F נמצאת
בפער האנרגטי ובמערכת מספר אלק' על פסים מלאים.

במבודדים $E_g \sim 5\,eV$

בחצאי מוליכים $E_g \sim 0.5\,eV$

מהו הגרם הנושא על ידי המצבים שמצאנו?

$$H = \frac{\hat{P}^2}{2m} + V(X)$$ $\Psi(X) = e^{ikx} u_k(x)$ היא פונקציה עצמית של k

$$H\Psi = E\Psi$$ עם אנרגיה E

$$H(k) = \frac{(\hat{P}+\hbar k)^2}{2m} + V(X)$$ לכן $u_k(x)$ הוא פונקציה עצמית של עם אותה אנרגיה

עם האנרגיה שלה $E(k)$

נניח כי מצאנו את u_k ואנו מעוניינים לחשב כיצד האנרגיה הם משתנה כאשר
מתבוננים ב $H(k+\Delta k)$ עבור Δk קטן נרצה ל $H(k+\Delta k) - H(k)$
נפרישה קטנה ונחשב בתורת ההפרעות מסדר ראשון

$$H(k+\Delta k) - H(k) = \cancel{\frac{1}{2m}\left[(\hat{P}+\hbar \ldots) - (\hat{P}+\hbar k)\right]^2 \simeq \frac{\hbar \Delta}{m}(\hat{P}+\hbar k)}$$ בסדר ראשון ב Δk

$$= \frac{1}{2m}\left[\hat{P}+\hbar(k+\Delta k)\right]^2 - \frac{1}{2m}(\hat{P}+\hbar k)^2 \simeq \hbar\Delta k \cdot \frac{1}{m}(\hat{P}+\hbar k)$$

השינוי בסדר ראשון ב $E(k)$:

$$\Delta E(k) = \langle u_k | H(k+\Delta k) - H(k) | u_k \rangle$$

$$= \hbar \Delta k \cdot \langle u_k | \frac{1}{m}(\hat{p} + \hbar k) | u_k \rangle$$

$$= \hbar \Delta k \cdot \langle \psi_k | \frac{\hat{p}}{m} | \psi_k \rangle = \hbar \Delta k \cdot \langle v \rangle$$

ערך התצפית של המהירות בגל ψ_k

$$\Rightarrow \langle \psi_k | v | \psi_k \rangle = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E(k)}{\partial k}$$

אנו רואים לכן כי במצב סטציונרי ב k (סטציונריות הנובעת מסימטריית ההזזה של הפוטנציאל המחזורי $V(x)$) מצב עם k נושא מהירות הפוכה ממצב ב $-k$ ולכן ערך התצפית הכללי של המהירות (ולכן גם הזרם) הנישאות על ידי פס מלא מתאפס.

מה השפעת שדה חשמלי על התוצאות הללו?
נניח כי השדה החשמלי חלש מספיק כדי לא לשנות את מבנה הפסים ואת הקשר בין ערך התצפית של המהירות ונגזרת האנרגיה לפי k, כפי שמצאנו לעיל.
אם נבנה חבילת גלים ממוקמת בתוך המערכת סביב x ו k ממוצעים חבילה זו תנוע בזמן תחת השפעתו של השדה החשמלי. כתוצאה מכך x ו k הממוצעים ישתנו בזמן. מצאנו כיצד x משתנה $\frac{dx}{dt} = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial E}{\partial k}$ עבור k נתון, אך בנוכחות שדה חשמלי גם k ישתנה בזמן.
הכח החשמלי מבצע עבודה על חבילת הגלים והתוצאה היא שהאנרגיה שלה משתנה בקצב הנתון על ידי

$$\frac{dE(k(t))}{dt} = v \cdot (-eE)$$

$$\Leftarrow \quad \frac{dE(k)}{dk} \cdot \frac{dk}{dt} = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial E}{\partial k}(-e)E$$

קיבלנו לכן כי k הממוצע משתנה בזמן לפי:

$$\frac{dk}{dt} = -\frac{e}{\hbar} E$$

תוצאות:

1. פס מלא איננו מוביל חשמל.

בטווח dk קיימים $2\cdot\frac{dk}{\frac{2\pi}{L}}$ (ספין) מצבים התורמים לזרם האלקטרונים הכולל. $\frac{1}{L}\cdot L\frac{dk}{\pi} = \frac{dk}{\pi}$

מהירות אלקטרונים אלה $\frac{1}{\hbar}\frac{\partial E}{\partial k}$ ולכן תרומתם לזרם הכולל היא

$$(-e)\cdot\frac{dk}{\pi}\cdot\frac{1}{\hbar}\frac{\partial E}{\partial k}$$

אם כל המצבים בפס מלאים, הזרם הכולל היא

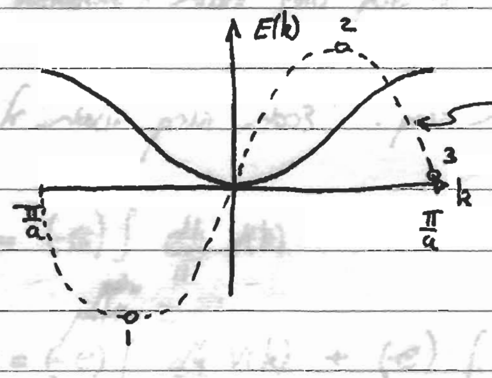
$$J = -\frac{e}{\pi\hbar}\int_{1st\,BZ} dk\,\frac{\partial E}{\partial k}$$

$$= -\frac{e}{\pi\hbar}\left[E\left(\frac{\pi}{a}\right) - E\left(\frac{-\pi}{a}\right)\right] = 0$$

מכיון שמתקיים $E(\vec{k}) = E(\vec{k}+\vec{K})$ כאשר $\vec{K}$ וקטור השריג ההפוך.
זו גם הסיבה שבגללה נקבע את המוליכות בין פס חצי מלא כמוליכות ואת המוליכות
עבור פס מלא כמבודד. במבודדים הפס התחתון- פס הערכיות מלא ופס העליון- פס ההולכה
ריק ומופרד על ידי פער $E_g \sim 5eV$ כך שבטמפ' החדר $e^{-\frac{E_g}{2k_BT}} \sim 10^{-42}$ הוא קרוב מאוד לאפס.
במוליכים למחצה המצב דומה אלא שהפער קטן יותר של $1-0.25eV$ ובטמפרטורת החדר אלקטרונים
מעוררים מספר מצבים בפס ההולכה ומשאירים חורים בפס הערכיות ולכן יש הולכה אך כי לא
טובה במיוחד $e^{-\frac{E_g}{2k_BT}} \sim 10^{-3}$.
כמו שראינו יש מערכות המתנהגות על פי תורה זו להיות מוליכים (מכיון שכל מצב בפס
יכול להכיל שני אלקטרונים עם ספינים הפוכים) ~~[illegible]~~ זה קיים גם בפס
חצי מלא. אם כל יש הערך מספר אי-זוגי של אלקטרוני הולכה. אך לאור זאת אין קיים מספר
אי זוגי של אלקטרוני הולכה בתא יחידה (מכיון רק בפס) של השריג, עלולים להיות למעשה מבודדים
בתוצאה מאפקטים של אי סדר לוקליזציה של אנדרסון או אינטראקציות לוקליזציה של Mott.

2. אוסצילציות Block.

נחזור לדוגמא בגז הדיספרסיה שקיבלנו במודל tight binding ונבדוק מהי המהירות המתאימה לכל מצב בגז $V=\frac{1}{\hbar}\frac{\partial E}{\partial k}$



בנוכחות שדה חשמלי קבוע $\frac{dk}{dt}=-\frac{e}{\hbar}E$

$$(*)\quad k(t)=k(0)-\frac{e}{\hbar}Et$$

נניח אחרי אלקטרון המתחיל במצב ① ונפעיל שדה חשמלי $E-$.
מהירות האלקטרון ההתחלתית שלילית וגדלה בהתמדה כשהאלקטרון נע ממצב ① למצב ② בהתאם ל (*). המצב הזה הוא התנהגות לה היינו מצפים ממשוואות התנועה הקלאסיות של אלקטרון בשדה חשמלי. מרגע שהאלקטרון הגיע למצב ② מהירותו קטנה כשהוא נע ממצב ② ל ③ ועד (לאחר שהוא מגיע מהקצה השני של ה BZ) למצב ①. האלקטרון נוטה לתנודות בעוצמות השדה החשמלי ומהירותו מתאפסת על קצוות ה BZ. תופעה זו היא תוצאה ישירה של המבנה של הפס הבודד של האלקטרון מהפוטנציאל המחזורי.
אם האלקטרון הזה נע בין התנגשויות בממוצע השריג מרחק במרחב k הגדול מגודלו של ה BZ שדה חשמלי DC הוא עלול להשרות זרם AC בדוגמא: Bloch oscillations.
הבעיה היא שתופעה זו קשה מאוד למדידה (וכנראה לא נצפתה עד היום) היות שעבור ערכים סבירים של E ו τ המרחק שאותו עובר k בין התנגשויות קטן מאוד ביחס לגודל ה BZ.
(~~בניגוד אל~~ עבור שדה חשמלי של $10^{-2}\frac{volt}{cm}$ ו $\tau=10^{-14}sec$, $\frac{eE\tau}{\hbar}\sim10^{-1}cm^{-1}$, $\frac{1}{a}\sim10^{8}cm^{-1}$)

בנוסף אלה נוכל להשרות את ~~המצב לשוני משוך~~ האלקטרון למצב התחלתי ולמנוע ממנו להשלים מסלול מעגלי הנובע מהמעבר על פני ה BZ כולו. כתוצאה מכך נע האלקטרון מרבית הזמן במהירות הקרובה למהירות ההתחלתית.

3. חורים

אחת ההצלחות הגדולות בתורה של תורת הפסים היא היכולת להסביר מדוע מתכות מסוימות מתנהגות כאילו נושאי המטען שבהן הינם בעלי מטען חיובי, כפי שניתן להסיק ממדידת ה Hall coefficient.

ראינו כי כל מצב מאוכלס בפס תורם $-e\frac{dk}{\pi}v(k)$ לצפיפות הזרם. צפיפות הזרם הנישאת ע"י המצבים המאוכלסים בפס היא לכן

$$J=(-e)\int_{\text{מצבים מאוכלסים}}\frac{dk}{\pi}v(k)$$

מכיוון שפס מלא אינו נושא זרם

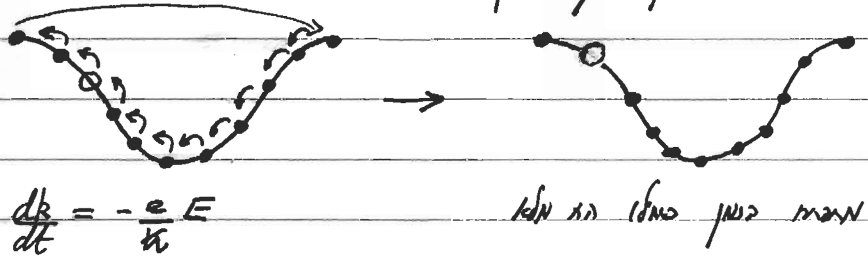
$$0=(-e)\int_{\text{מצבים מאוכלסים}}\frac{dk}{\pi}v(k)+(-e)\int_{\text{מצבים לא מאוכלסים}}\frac{dk}{\pi}v(k)$$

נקבל

$$J=(+e)\int_{\text{מצבים לא מאוכלסים}}\frac{dk}{\pi}v(k)$$

הזרם הנוצר מהמצבים המאוכלסים באלקטרונים שווה לזרם במערכת בה מצבים אלה ריקים ואילו המצבים שהיו ריקים במערכת המקורית מלאים בחלקיקים עם מטען $+e$.
באיזה מקרה טבעי לבחור בתאור זה של המערכת? נראה כי זהו המצב אם המצבים הלא מאוכלסים המקוריים נמצאים ליד המקסימום של פס הולכה.

נתבונן במצב לא מאוכלס אחד בפס המלא אלקטרונים ונחקור אותו כאשר מופעל שדה חשמלי E על המערכת.



ה k של מצב זה מתפתח בזמן כאילו הוא מלא

$$\frac{dk}{dt}=-\frac{e}{\hbar}E$$

תאוצת מצב זה היא לכן

$$a=\frac{dv}{dt}=\frac{d}{dt}\left(\frac{1}{\hbar}\left(\frac{\partial E}{\partial k}\right)\right)$$

$$= \frac{1}{\hbar}\frac{\partial^2 E}{\partial k^2}\frac{dk}{dt}$$

$$= \left(-\frac{1}{\hbar^2}\frac{\partial^2 E}{\partial k^2}\right) e \cdot E$$

מכיוון שעל פי שינוי ונס $\frac{\partial^2 E}{\partial k^2} < 0$ נוכל לפרש תנועה זו כתאוצה $a = \frac{E}{m}$
של חלקיק בעל מטען $+e$ ומסה אפקטיבית $0 < \frac{1}{m^*} = -\frac{1}{\hbar^2}\frac{\partial^2 E}{\partial k^2} > 0$
(אם היינו מעדיפים לפרש תנועה זו כתאוצה של מטען $-e$ היינו צריכים לשייך לו את מסה שלילית)

לכן כל עודף תנועת המצבים הלא מאוכלסים במרחב k מוגבלת לאזור הסמוך למקסימום הפס (כהו המצב אם הם נמצאים בסביבה זו במרכזה המוקדית ואם, כפי שאנו תולה, $\vec{E}$ קטן כך שהם אינם יוצאים מסביבה זו למרחק רב בשלבם הם מגיעים תנועה אלין) הם מתנהגים כאילו היו מטענים חיוביים בעלי מסה m^*.