

Semiklassinen elektronidynamiikka

Blochin teoria osoittaa, että metallikeiteissä elektronit eivät siroa ioneista (kuten Druden malli olettaa). Metallit eivät kuitenkaan ole täydellisiä johteita, sillä mikään todellinen kide ei ole täydellinen hila. Metalleissa sähköinen vastus aiheutuu epäpuhtauksista, puuttuvista ioneista hilapisteissä tai muista kiderakenteen virheistä, jotka sirottavat elektroneja. Vaikka kide olisi täysin puhdas, ionien termiset värähtelyt aiheuttaisivat poikkeamia täydelliseen kiderakenteeseen ja nämä puolestaan sirottisivat elektroneja.

Ajatellaan nyt, että on olemassa jokin sirontamekanismi, joka häiritsee elektronien liikettä (tarkastellaan itse sirontaa myöhemmin) ja katsotaan, miten elektronit liikkuvat törmäysten välillä.

Virran kuljetukseen osallistuvat elektronit ovat Blochin elektroneja. Muodostetaan Blochin tiloista aaltopaketti

$$\psi_n(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}'} g(\mathbf{k}') e^{-i\mathcal{E}_n(\mathbf{k}')t/\hbar} \psi_{n\mathbf{k}'}(\mathbf{r})$$

ja oletetaan, että kuljetukseen osallistuvat tilat ovat keskittyneet tietyn aaltovektorin $\mathbf{k}$ läheisyyteen, ts.

$$g(\mathbf{k}') \approx 0 \text{ kun } |\mathbf{k} - \mathbf{k}'| > \Delta k,$$

missä Δk on pieni verrattuna Brillouinin vyöhykkeen kokoon. Tällöin $\mathcal{E}_n(\mathbf{k})$ vaihtelee vain vähän aaltopakettin eri tilojen välillä, jolloin suuretta

$$\frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \mathcal{E}_n(\mathbf{k}) = \nabla_{\mathbf{k}} \omega(\mathbf{k})$$

voidaan pitää aaltopakettin ryhmänopeutena. Toisaalta Blochin tilassa elektronin keskimääräinen nopeus on myöskin

$$\mathbf{v}_n(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \mathcal{E}_n(\mathbf{k}),$$

eli elektronin keskimääräinen nopeus on sama kuin aaltopakettin ryhmänopeus.

Tarkastellaan aaltopakettia pisteissä $\mathbf{r}_0$ ja $\mathbf{r} = \mathbf{r}_0 + \mathbf{R}$, missä $\mathbf{R}$ on Bravais'n hilan vektori. Blochin teoreeman mukaan on

$$\begin{aligned} \psi_n(\mathbf{r}_0 + \mathbf{R}, t) &= \sum_{\mathbf{k}'} g(\mathbf{k}') e^{-i\mathcal{E}_n(\mathbf{k}')t/\hbar} \psi_{n\mathbf{k}'}(\mathbf{r}_0 + \mathbf{R}) \\ &= \sum_{\mathbf{k}'} g(\mathbf{k}') e^{i(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{R} - \mathcal{E}_n(\mathbf{k}')t/\hbar)} \psi_{n\mathbf{k}'}(\mathbf{r}_0). \end{aligned}$$

Tarkasteltuna hilavektorin $\mathbf{R}$ funktiona tämä on vapaata hiukkasta kuvaavien tasoaaltojen $\exp[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R} - \mathcal{E}_n(\mathbf{k})t/\hbar)]$ superpositio painokerrointen ollessa

$$\bar{g}(\mathbf{k}) = g(\mathbf{k}) \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}_0).$$

Jos Δk on sen alueen koko, jossa $g(\mathbf{k})$, ja niin muodoin myös $\bar{g}(\mathbf{k})$, on nollasta poikkeava, niin tavanmukaisen aaltopaketteihin sovellettavan päättelyn mukaisesti $\psi_n(\mathbf{r}_0 + \mathbf{R}, t)$ on nollasta poikkeava alueella, jonka dimensio on suuruusluokkaa $\Delta R \approx 1/\Delta k$. Oletuksen mukaan Δk oli pieni verrattuna Brillouinin vyöhykkeen dimensioon, joka puolestaan on suuruusluokkaa $1/a$ kun a

on hilavakio. Funktion $\psi_n(\mathbf{r}_0 + \mathbf{R}, t)$ leveys on siten paljon suurempi kuin hilavakio a .

Saamme tuloksen: *sellaisten Blochin tilojen, joiden aaltovektori on hyvin määritelty Brillouinin vyöhykkeen mittakaavassa, muodostama aaltopaketti välttämättä leviää reaaliavaruudessa useiden alkeiskoppien alueelle.* Aaltopaketteja voidaan käsitellä klassisesti, mikäli ei ole tarpeen paikantaa elektroneja aaltopakettin kantaman sisällä. Tällöinkään täysin klassinen käsittely ei kelpaa, sillä hilassa vaikuttava periodinen potentiaali vaihtelee väleillä, jotka ovat pieniä verrattuna aaltopakettin levenemään. Periodinen kenttä on siis käsiteltävä kvanttimekaanisesti. Jos toisaalta ulkoinen sähkömagneettinen kenttä vaihtelee erittäin vähän muutamien alkeiskoppien kattamalla alueella voidaan sen vaikutus elektronien aaltopaketteihin käsitellä klassisesti: päädytään *semiklassiseen malliin*

Malli

Semiklassinen malli pohjautuu pelkästään metallin vyöhykenteeseen, ts. funktioihin $\mathcal{E}_n(\mathbf{k})$. Millään muulla tavoin ei malliin syötetä tietoa periodisesta potentiaalista. Kun funktiot $\mathcal{E}_n(\mathbf{k})$ on annettu, malli liittyy jokaiseen elektroniin paikan $\mathbf{r}$ ja aaltovektorin $\mathbf{k}$. Sähkö- ja magneettikenttien, $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ ja $\mathbf{H}(\mathbf{r}, t)$, vaikutuksessa vyöindeksi, paikka ja aaltovektori kehittyvät kuten:

1. vyöindeksi n on liikevakio. Semiklassinen malli unohtaa voiden väliset transiitiot.

2. vyöllä n olevan elektronin paikka ja aaltovektori noudattavat liikeyhtälöitä

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{r}} &= \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \mathcal{E}_n(\mathbf{k}) \\ \hbar \dot{\mathbf{k}} &= -e [\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{c} \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, t)]. \end{aligned} \quad (1)$$

3. tietyllä vyöllä n ja tietyssä paikassa $\mathbf{r}$ ei ole olemassa kahta erillistä elektronia, joiden aaltovektorit eroavat toisistaan käänteishilavektorilla $\mathbf{K}$, ts. aaltovektorit $\mathbf{k}$ ja $\mathbf{k} + \mathbf{K}$ ovat ekvivalentteja (Blochin teoreema). Yksittäisen vyön kaikki erilliset aaltovektorit ovat käänteishilan alkeiskopissa.

Huom. 1. Koska ulkoisten kenttien ei oleteta aiheuttavan transiitioita vyöltä toiselle, säilyttävät elektronit vyöhön liittyvän identiteettinsä. Voidaan ajatella, että jokaisella vyöllä on oman tyyppisensä elektronit. Näiden tyyppien ominaisuudet vaihtelevat huomattavasti vyöltä toiselle. Osoittautuu kuitenkin, että on tarpeen tarkastella ainoastaan muutaman tyyppisiä elektroneja: sellaisia, joiden energiavyöt poikkeavat Fermi-energiasta muutaman $k_B T$:n verran.

Huom. 2. Aaltovektorin liikeyhtälöä ei voida (osata) johtaa eksaktisti. Heuristisesti sitä voidaan perustella seuraavasti:

Olkkoon ϕ staattisen sähkökentän $\mathbf{E}$ aiheuttava potentiaali, ts. $\mathbf{E} = -\nabla\phi$. Elektronin liikuessa tässä kentässä on syytä uskoa, että energia

$$\mathcal{E}_n(\mathbf{k}(t)) - e\phi(\mathbf{r})$$

pysyy vakiona. Tämän energian aikaderivaatta on

$$\nabla_{\mathbf{k}} \mathcal{E}_n \cdot \dot{\mathbf{k}} - e \nabla \phi \cdot \dot{\mathbf{r}},$$

joka paikan liikeyhtälön perusteella voidaan kirjoittaa muotoon

$$\mathbf{v}_n(\mathbf{k}) \cdot [\hbar \dot{\mathbf{k}} - e \nabla \phi]. \quad (2)$$

Tämä häviää, jos

$$\hbar \dot{\mathbf{k}} = e \nabla \phi = -e \mathbf{E}.$$

Tämä ei ole välttämätön ehto lausekkeen (2) häviämiseksi. Lisäämällä termiin $\hbar \dot{\mathbf{k}}$ mitä tahansa, mikä on kohtisuorassa nopeutta $\mathbf{v}_n$ vastaan, esim. $e/c \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, t)$, saadaan ko. ehto voimaan.

Huom. 3. Liikeyhtälöiden (2) mukaan suure $\hbar \dot{\mathbf{k}}$ kehittyy ainoastaan ulkoisten kenttien vaikutuksesta. Suure $\hbar \dot{\mathbf{k}}$ ei ole liikemäärä, sillä liikemäärän muutokseen vaikuttaa elektroneihin kohdistuva kokonaisvoima, siis myös hilassa vaikuttava periodinen potentiaali.

Mallin voimassaolon ehdot

On selvää, että ulkoisen sähkökentän ollessa kyllin voimakas se voi aiheuttaa transitoita vyöltä toiselle. Tällöin semiklassisen mallin oletukset eivät ole enään voimassa. Voidaan osoittaa, että malli toimii, jos sähkökenttä toteuttaa ehdon

$$eEa \ll \frac{[\mathcal{E}_{\text{gap}}(\mathbf{k})]^2}{\mathcal{E}_F}$$

ja magneettikenttä ehdon

$$\hbar \omega_c \ll \frac{[\mathcal{E}_{\text{gap}}(\mathbf{k})]^2}{\mathcal{E}_F},$$

missä $\omega_c = eH/mc$ on syklotronifrekvenssi. Metalleilla maksimaaliset sähkökentät ovat suuruusluokkaa 10^{-2}V/cm (virtatiheys $\approx 10^2 \text{A/cm}^2$ ja resistiivisyys $\approx 100 \mu\Omega \text{cm}$). Jos hilavakio a on atomin suuruusluokkaa, ts. 10^{-8}cm , niin eEa on kertalukua 10^{-10}eV . Koska metallien Fermi-energiat ovat muutamia elektronivoltteja, täytyisi energiaraon olla vain 10^{-5}eV , ennen kuin voimassaoloehto rikkoutuisi. Tyypillisesti energiaraot ovat kertalukua 0.1eV , joten mitään vaaraa ehdon rikkoutumisesta ei ole. Magneettikenttää koskeva ehto on paljon helpompi rikkoa. Jos kentän voimakkuus on 1T , niin $\hbar \omega_c$ on kertalukua 10^{-4}eV . Tällöin ehdon rikkoutumiseen riittää, että energiarako on kapeampi kuin 10^{-2}eV . Mallin voimassa olo edellyttää myöskin, että ulkoisten kenttien fotonit eivät voi indusoida transitoita vyöltä toiselle, ts. on oltava voimassa

$$\hbar \omega \ll \mathcal{E}_{\text{gap}}.$$

k-summaukset

Olkoon $F(\mathbf{k})$ mielivaltainen funktio ja tarkastellaan summaa

$$S = \sum_{\mathbf{k}} F(\mathbf{k}).$$

Koska yhden sallitun aaltovektorin k -avaruudessa viemä tilavuus on

$$\Delta \mathbf{k} = \frac{(2\pi)^3}{V},$$

missä V on hilan tilavuus, voidaan tämä kirjoittaa muotoon

$$S = \frac{V}{8\pi^3} \sum_{\mathbf{k}} F(\mathbf{k}) \Delta \mathbf{k}.$$

Jos nyt $V \rightarrow \infty$, niin vastaavasti $\Delta \mathbf{k} \rightarrow 0$ ja

$$\lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{V} S = \int \frac{d\mathbf{k}}{8\pi^3} F(\mathbf{k}).$$

Yleensäkin, jos tilavuus V on suuri, kirjoitetaan

$$\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} F(\mathbf{k}) = \int \frac{d\mathbf{k}}{8\pi^3} F(\mathbf{k}).$$

Tästä nähdään, että tilatiheys k -avaruudessa on $g/8\pi^3$. Tässä g on degeneraatiotekijä, ts. g kertoo miten monta hiukasta voi olla samassa $\mathbf{k}$ -tilassa. Elektroneille tilatiheys on siis $1/4\pi^3$

Täydet vyöt

Täydellä vyöllä jokaisessa k -avaruuden elementissä $d\mathbf{k}$ on $V d\mathbf{k}/4\pi^3$ elektronia, joten tilavuuselementissä $d\mathbf{r}$ elektronien lukumäärä on $d\mathbf{r} d\mathbf{k}/4\pi^3$. Elektronitiheys 6-ulotteisessa rp -faasiavaruudessa on siis $1/4\pi^3$. Koska tarkastelemme elektronien liikettä klassisesti, voimme käyttää Liouvillen teoreemaa: *Olkoon Ω_t hetkellä t jokin 6-ulotteisen faasiavaruuden alue. Ajan myötä pisteet $(\mathbf{r}, \mathbf{k}) \in \Omega_t$ kehittyvät klassisten liikeyhtälöiden mukaisesti pisteiksi $(\mathbf{r}', \mathbf{k}')$ ja muodostavat hetkellä t' faasiavaruuden alueen $\Omega_{t'} \ni (\mathbf{r}', \mathbf{k}')$, jonka tilavuus on sama kuin alueen Ω_t tilavuus.*

Olkoon nyt Ω jokin faasiavaruuden alue. Tähän kuuluvat elektronit olivat hetkellä 0 alueessa Ω_0 , eli elektronien lukumäärä molemmissa alueissa on sama. Toisaalta Liouvillen teoreeman mukaan alueiden Ω ja Ω_0 tilavuus on sama, joten elektronitiheys on myös sama. Elektronitiheys pysyy siis täysillä vöillä vakiona $1/4\pi^3$ riippumatta siitä, minkälaisia törmäyksiä elektronit kokevat tai millaiset ulkoiset kentät niihin vaikuttavat. Aaltovektorin $\mathbf{k}$ läheisyydessä elementissä $\mathbf{k}$ olevien elektronien lukumäärä tilavuusyksikköä kohti on $1/4\pi^3$. Koska elektronien (aaltopakettien) nopeus on

$$\mathbf{v}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \mathcal{E}(\mathbf{k}),$$

saadaan täyden vyön aiheuttamaksi virtatiheydeksi

$$\mathbf{j} = -e \int \frac{d\mathbf{k}}{4\pi^3} \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \mathcal{E}(\mathbf{k}).$$

Tässä integrointi ulottuu ensimmäisen Brillouinin vyöhykkeen yli. Koska periodisen funktion $\mathcal{E}(\mathbf{k})$

noudattaa käänteishilan periodisuutta) gradientin integraali yli alkeiskopin on nolla, täysien vöiden kontribuutio virtatiheyteen häviää.

Vastaavasti energiavirtatiheys

$$\begin{aligned} j_{\mathcal{E}} &= \int \frac{d\mathbf{k}}{4\pi^3} \mathcal{E}(\mathbf{k}) \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \mathcal{E}(\mathbf{k}) \\ &= \frac{1}{2} \int \frac{d\mathbf{k}}{4\pi^3} \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} (\mathcal{E}(\mathbf{k}))^2 \end{aligned}$$

on täydellä vyöllä nolla.

Nähdään, että

- *täydet vyöt eivät osallistu sähkövirran eivätkä termisen energian kuljetukseen, tai johtavuuden aiheuttavat osittain täytetyillä vöillä olevat elektronit.*
- kiinteän aineen kaikkien vöiden ollessa täynnä tai tyhjiä kyseessä on eriste. Koska jokaisella vyöllä olevien tilojen lukumäärä on sama kuin alkeiskoppien lukumäärä, voivat kaikki vyöt olla joko tyhjiä tai täysiä vain, jos elektronien lukumäärä alkeiskoppia kohti on parillinen.

Ulkoinen staattinen kenttä

Tasaisessa staattisessa sähkökentässä liikeyhtälön

$$\hbar \dot{\mathbf{k}} = -e \left[\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{c} \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) \right].$$

ratkaisu on

$$\mathbf{k}(t) = \mathbf{k}(0) - \frac{e\mathbf{E}t}{\hbar}.$$

Ajassa t jokaisen elektronin aaltovektori muuttuu samalla määrällä $-e\mathbf{E}t/\hbar$.

Huom. Koska vyöenergiat $\mathcal{E}(\mathbf{k})$ ovat periodisia funktioita, täysillä vöillä elektronit vain järjestyvät uudelleen täsmälleen samanlaiseen konfiguraatioon eli mitään ei tapahdu.

Elektronin nopeus

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

ei ole verrannollinen aaltovektoriin $\mathbf{k}$. Sen sijaan se on käänteishilan periodisuutta noudattava aaltovektorin funktio.

Staattisen sähkökentän vaikutuksesta nopeus muuttuu kuten

$$\mathbf{v}(\mathbf{k}(t)) = \mathbf{v} \left(\mathbf{k}(0) - \frac{e\mathbf{E}t}{\hbar} \right).$$

Koska $\mathbf{v}(\mathbf{k})$ on periodinen, sen täytyy olla rajoitettu. Jos $\mathbf{E}$ on jonkin käänteishilavektorin suuntainen, on nopeus $\mathbf{v}(\mathbf{k})$ oskilloiva (vapaan elektronin nopeus on suoraan verrannollinen aaltovektoriin $\mathbf{k}$ ja kasvaa lineaarisesti ajan myötä).

Huom. Käytännössä elektronien relaksaatioajat ovat niin lyhyitä ($\approx 10^{-14}$ s), että kohtuullisilla sähkökentillä (≈ 1 V/m) aaltovektorin muutokset ovat niin pieniä ($eE\tau/\hbar \approx 10\text{m}^{-1}$) verrattuna vyöhykedimensioihin ($1/a \approx 10^{10}\text{m}^{-1}$), jotta tämä oskilloiva käyttäytyminen voitaisiin suoraan havaita.

Aukot

1. Koska tilavuuselementissä $d\mathbf{k}$ olevien elektronien kontribuutio virtatiheyteen on $-e\mathbf{v}(\mathbf{k})d\mathbf{k}/4\pi^3$, aiheuttavat tietyllä vyöllä olevat elektronit virtatiheyden

$$\mathbf{j} = -e \int_{\text{miehitetyt}} \frac{d\mathbf{k}}{4\pi^3} \mathbf{v}(\mathbf{k}),$$

missä integrointi ulotetaan vyön miehitettyjen tilojen yli. Koska täydet vyöt eivät kuljeta virtaa, voidaan kirjoittaa

$$\begin{aligned} 0 &= \int_{\text{vyöhyke}} \frac{d\mathbf{k}}{4\pi^3} \mathbf{v}(\mathbf{k}) \\ &= \int_{\text{miehitetyt}} \frac{d\mathbf{k}}{4\pi^3} \mathbf{v}(\mathbf{k}) \\ &\quad + \int_{\text{miehittämättömät}} \frac{d\mathbf{k}}{4\pi^3} \mathbf{v}(\mathbf{k}). \end{aligned}$$

Nähdään, että virtatiheys voidaan kirjoittaa myös muotoon

$$\mathbf{j} = +e \int_{\text{miehittämättömät}} \frac{d\mathbf{k}}{4\pi^3} \mathbf{v}(\mathbf{k}),$$

eli *tietyjen miehitettyjen tilojen aiheuttama sähkövirta on täsmälleen sama kuin virta, joka aiheutuu näiden tilojen ollessa miehittämättömiä ja vyön muiden tilojen ollessa +e-varauksisten hiukkasten miehittämiä*. Voidaan siis ajatella, että virtaa kuljettavat positiivisesti varatut elektronien vapaiksi jättämällä paikoilla (k -avaruudessa) olevat fiktiiviset hiukkaset.

2. Semiklassiset liikeyhtälöt määräävät yksikäsitteisesti faasiavaruuden pisteen $(\mathbf{r}, \mathbf{k})$ trajektorin: jos $(\mathbf{r}, \mathbf{k})$ tunnetaan hetkellä $t = 0$, sen kehitys on yksikäsitteisesti määrätty kaikkina muina hetkinä. Näin ollen trajektorit eivät voi leikata toisiaan. Jaetaan ne kahteen joukkoon riippuen siitä onko niiden esittämä tila hetkellä $t = 0$ miehitetty vai miehittämätön. Nähdään siis, että kaikkina myöhempinä aikoina miehitetyt tilat pysyvät edelleenkin alkuperäisillä miehitetyillä trajektoreilla ja vastaavasti miehittämättömät tilat miehittämättömillä trajektoreilla. Miehitettyjen ja miehittämättömien tilojen evoluutio määräytyy siis täysin trajektorien struktuurista riippumatta siitä, sattuuko jokin elektroni seuraamaan kyseisiä trajektoreita.

Erikoisesti nähdään, että *vyön miehittämättömät tilat kehittyvät ulkoisten kenttien vaikutuksesta ajan kuluessa täsmälleen samoin kuin ne olisivat todellisten elektronien (varaus $-e$) miehittämiä*.

3. Aukkojen vasteiden määrittämiseksi on siis tarpeen tarkastella vain millaisia vaikutuksia ulkoisilla kentillä on elektroneihin, joiden semiklassinen liikeyhtälö on

$$\hbar \dot{\mathbf{k}} = -e \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{H} \right).$$

Termisessä tasapainossa tai sitä lähellä olevassa tilassa miehittämättömät tilat ovat yleensä vyön maksimin ympäristössä. Olkoon vyön $\mathcal{E}(\mathbf{k})$ maksimi pisteessä $\mathbf{k}_0$. Maksimista johtuen Taylorin sarjan

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(\mathbf{k}) &= \mathcal{E}(\mathbf{k}_0) + \nabla_{\mathbf{k}} \mathcal{E}(\mathbf{k})|_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_0} \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \\ &\quad - A(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)^2 + \dots \end{aligned}$$

lineaarinen termi häviää, joten

$$\mathcal{E}(\mathbf{k}) \approx \mathcal{E}(\mathbf{k}_0) - A(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)^2.$$

Tässä kerroin A on positiivinen ($\mathcal{E}$:llä maksimi).

Määritellään massan laatuinen suure m^* siten, että

$$\frac{\hbar^2}{2m^*} = A.$$

Maksimipisteen $\mathbf{k}_0$ läheisyydessä olevien tilojen nopeudeksi saadaan

$$\mathbf{v}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \mathcal{E}(\mathbf{k}) \approx -\frac{\hbar(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)}{m^*},$$

Kiihtyvyys on puolestaan

$$\mathbf{a} = \frac{d}{dt} \mathbf{v}(\mathbf{k}) = -\frac{\hbar}{m^*} \dot{\mathbf{k}},$$

eli vastakkaissuuntainen aaltovektorin muutokselle $\dot{\mathbf{k}}$. Nämä tulokset voidaan tulkita kahdella ekvivalentilla tavalla:

- elektronit, joiden aaltovektorit ovat energiavyön maksimin läheisyydessä, vastaavat ulkoihin kenttiin aivan kuin niillä olisi negatiivinen massa $-m^*$.
- elektronit, joiden aaltovektorit ovat energiavyön maksimin läheisyydessä, vastaavat ulkoihin kenttiin aivan kuin niillä olisi positiivinen varaus $+e$ ja positiivinen massa m^* .

Koska aukot vastaavat ulkoihin kenttiin samoin kuin ko. aukkoja miehittävät elektronit, nähdään, että aukot käyttäytyvät kuten positiivisesti varatut hiukkaset. Tarkastellaan nyt tiloja, jotka eivät välttämättä ole vöiden maksimien lähistöllä. Aaltovektorin muutoksen $\dot{\mathbf{k}}$ ja kiihtyvyyden välinen skalaaritulo on

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{a} &= \dot{\mathbf{k}} \cdot \frac{d}{dt} \mathbf{v} = \dot{\mathbf{k}} \cdot \frac{d}{dt} \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \mathcal{E}(\mathbf{k}) \\ &= \frac{1}{\hbar} \sum_{ij} \dot{k}_i \frac{\partial^2 \mathcal{E}}{\partial k_i \partial k_j} \dot{k}_j. \end{aligned}$$

Jos halutaan, että elektronit käyttäytyvät kuten positiivisesti varatut hiukkaset, täytyy kiihtyvyyden olla pääasiallisesti vastakkaisuuntainen aaltovektorin muutokseen nähden eli skalaaritulon $\dot{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{a}$ täytyy olla negatiivinen. Riittävä ehto tälle on

$$\sum_{ij} \Delta_i \frac{\partial^2 \mathcal{E}}{\partial k_i \partial k_j} \Delta_j < 0, \quad \forall \Delta.$$

Energian $\mathcal{E}(\mathbf{k})$ paikallisessa maksimissa tämä ehto on ilmeisesti voimassa.

Suureta m^* , joka määrää aukkojen dynamiikan vöiden maksimien läheisyydessä, sanotaan *efektiiviseksi massaksi*. Yleisesti määritellään ”efektiivinen massatensori”:

$$(M^{-1}(\mathbf{k}))_{ij} = \pm \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \mathcal{E}(\mathbf{k})}{\partial k_i \partial k_j} = \pm \frac{1}{\hbar} \frac{\partial v_i}{\partial k_j}.$$

Tässä valitaan merkiksi $-$ silloin, kun $\mathbf{k}$ on lähellä vyön maksimia (aukot) ja $+$ silloin, kun $\mathbf{k}$ on lähellä minimiä (elektronit).

Koska kiihtyvyys on

$$\mathbf{a} = \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \pm M^{-1}(\mathbf{k}) \hbar \dot{\mathbf{k}},$$

voidaan semiklassinen liikeyhtälö kirjoittaa muotoon

$$M(\mathbf{k}) \mathbf{a} = \mp e \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} \mathbf{v}(\mathbf{k}) \times \mathbf{H} \right).$$

Tasainen magneettikenttä

Tarkastellaan elektroneja tasaisessa magneettikentässä.

Semiklassisten liikeyhtälöiden

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{r}} &= \mathbf{v}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \mathcal{E}(\mathbf{k}) \\ \hbar \dot{\mathbf{k}} &= -e \frac{1}{c} \mathbf{v}(\mathbf{k}) \times \mathbf{H} \end{aligned}$$

perusteella on

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \mathcal{E}(\mathbf{k}) &= \nabla_{\mathbf{k}} \mathcal{E}(\mathbf{k}) \cdot \dot{\mathbf{k}} = \hbar \mathbf{v}(\mathbf{k}) \cdot \dot{\mathbf{k}} \\ &= -\frac{e}{c} \mathbf{v}(\mathbf{k}) \cdot (\mathbf{v}(\mathbf{k}) \times \mathbf{H}) = 0, \end{aligned}$$

eli elektronin energia $\mathcal{E}(\mathbf{k})$ on liikevakio. Samoin on myös vektorin $\mathbf{k}$ magneettikentän suuntainen komponentti liikevakio. Elektronit liikkuvat siis k -avaruudessa pitkin vakioenergiapintojen ja kohtisuorassa magneettikenttää vastaan olevien tasojen leikkauskäyriä.

Liikeratojen kulkusuunta k -avaruudessa voidaan päätellä seuraavasti:

- nopeus $\mathbf{v}$ on verrannollinen energian gradienttiin, joka puolestaan on suuntautunut kohti kasvavia energioita.
- jos $\mathbf{H}$ on suuntautunut ylöspäin ja energiat kasvavat oikealle päin, niin liikeyhtälöiden mukaan $\dot{\mathbf{k}}$ osoittaa suoraan eteen päin.

Katsottaessa k -avaruudessa elektronien liikkeen suuntaan magneettikentän osoittaessa ylös jäävät suuremmat energiat oikealle puolelle.

Olkoon $\hat{\mathbf{H}}$ magneettikentän suuntainen yksikkövektori.

Nyt

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{H}} \times \hbar \dot{\mathbf{k}} &= -\frac{e}{c} \hat{\mathbf{H}} \times (\mathbf{v}(\mathbf{k}) \times \mathbf{H}) \\ &= -\frac{e}{c} \left((\hat{\mathbf{H}} \cdot \mathbf{H}) \mathbf{v}(\mathbf{k}) - (\hat{\mathbf{H}} \cdot \mathbf{v}(\mathbf{k})) \mathbf{H} \right) \\ &= -\frac{eH}{c} \left(\dot{\mathbf{r}} - (\hat{\mathbf{H}} \cdot \dot{\mathbf{r}}) \hat{\mathbf{H}} \right) = -\frac{eH}{c} \dot{\mathbf{r}}_{\perp}, \end{aligned}$$

missä $\mathbf{r}_{\perp} = \mathbf{r} - (\hat{\mathbf{H}} \cdot \mathbf{r}) \hat{\mathbf{H}}$ on radiusvektorin kohtisuorassa magneettikenttää vastaan oleva komponentti.

Integroimalla tämä yhtälö saadaan

$$\mathbf{r}_{\perp}(t) - \mathbf{r}_{\perp}(0) = -\frac{\hbar c}{eH} \hat{\mathbf{H}} \times (\mathbf{k}(t) - \mathbf{k}(0)).$$

Koska k -avaruuden trajektorii $\mathbf{k}(t) - \mathbf{k}(0)$ on kohtisuorassa magneettikenttää vastaan, nähdään, että r -avaruudessa elektronin radan projektio magneettikenttää vastaan kohtisuoralla tasolla on k -avaruuden rata kierrettynä 90° ja skaalattuna tekijällä $\hbar c / eH$.

Tarkastellaan rataa energiapinnalla $\mathcal{E}$. Pisteiden $\mathbf{k}_1$ ja $\mathbf{k}_2$ välillä käytetty aika on

$$t_2 - t_1 = \int_{t_1}^{t_2} dt = \int_{\mathbf{k}_1}^{\mathbf{k}_2} \frac{d\mathbf{k}}{|\dot{\mathbf{k}}|}.$$

Koska liikeyhtälöiden perusteella on

$$\begin{aligned} |\dot{\mathbf{k}}| &= \frac{eH}{\hbar c} |\mathbf{v}(\mathbf{k}) \times \hat{\mathbf{H}}| = \frac{eH}{\hbar c} |v_\perp| \\ &= \frac{eH}{\hbar^2 c} |(\nabla_{\mathbf{k}} \mathcal{E})_\perp|, \end{aligned}$$

saadaan aikaväliksi

$$t_2 - t_1 = \frac{\hbar^2 c}{eH} \int_{\mathbf{k}_1}^{\mathbf{k}_2} \frac{d\mathbf{k}}{|(\nabla_{\mathbf{k}} \mathcal{E})_\perp|}.$$

Geometrinen tulkinta: Olkoon $\Delta(\mathbf{k})$ radan tasossa ja rataa vastaan kohtisuora vektori, joka yhdistää radan pisteen $\mathbf{k}$ samalla tasolla olevaan energiaa $\mathcal{E} + \Delta\mathcal{E}$ vastaavaan rataan. Jos $\Delta\mathcal{E}$ on pieni, voidaan kirjoittaa

$$\Delta\mathcal{E} = \nabla_{\mathbf{k}} \mathcal{E} \cdot \Delta(\mathbf{k}) = (\nabla_{\mathbf{k}} \mathcal{E})_\perp \cdot \Delta(\mathbf{k}).$$

Koska $\nabla_{\mathbf{k}} \mathcal{E}$ on kohtisuorassa vakioenergiapintaa vastaan, ja siis kohtisuorassa rataa vastaan, täytyy vektorin $(\nabla_{\mathbf{k}} \mathcal{E})_\perp$ olla vektorin $\Delta(\mathbf{k})$ suuntainen. Voidaan siis kirjoittaa

$$\Delta\mathcal{E} = |(\nabla_{\mathbf{k}} \mathcal{E})_\perp| \Delta(\mathbf{k}),$$

ja

$$t_2 - t_1 = \frac{\hbar^2 c}{eH} \frac{1}{\Delta\mathcal{E}} \int_{\mathbf{k}_1}^{\mathbf{k}_2} \Delta(\mathbf{k}) d\mathbf{k}.$$

Tässä integraali on pisteestä $\mathbf{k}_1$ pisteeseen $\mathbf{k}_2$ kulkevien naapurikäyrien väliin jäävä liiketason pinta-ala. Kun annetaan $\Delta\mathcal{E} \rightarrow 0$, saadaan

$$t_2 - t_1 = \frac{\hbar^2 c}{eH} \frac{\partial A_{1,2}}{\partial \mathcal{E}}.$$

Tässä $\partial A_{1,2} / \partial \mathcal{E}$ kertoo, millä nopeudella pisteiden $\mathbf{k}_1$ ja $\mathbf{k}_2$ välinen liikerata pyyhkii pintaa annetulla tasolla energiaa $\mathcal{E}$ kasvatettaessa.

Tarkastellaan nyt suljettua käyrää ($\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_2$). Tällöin $t_2 - t_1$ on radan periodi T . Jos A on k -avaruudessa radan sulkema liiketason pinta-ala, niin

$$T(\mathcal{E}, k_z) = \frac{\hbar^2 c}{eH} \frac{\partial}{\partial \mathcal{E}} A(\mathcal{E}, k_z).$$

Määritellään *efektiivinen syklotronimassa* $m^*(\mathcal{E}, k_z)$ siten, että

$$m^*(\mathcal{E}, k_z) = \frac{\hbar^2}{2\pi} \frac{\partial}{\partial \mathcal{E}} A(\mathcal{E}, k_z).$$

Periodi voidaan nyt kirjoittaa vapaitten elektronien tuloksen kanssa analogiseen muotoon

$$T = \frac{2\pi}{\omega_c} = \frac{2\pi m^* c}{eH}.$$

Huom. Efektiivinen syklotronimassa ei välttämättä ole sama kuin muissa yhteyksissä käytetyt efektiiviset massat.

Kohtisuorat sähkö- ja magneettikentät
Kirjoitetaan aaltovektorin liikeyhtälö muotoon

$$\hbar \dot{\mathbf{k}} + e\mathbf{E} = -\frac{e}{c} \mathbf{v}(\mathbf{k}) \times \mathbf{H}$$

ja, samoin kuin edellä, muodostetaan yhtälön molemmiin puolin ristitulo vektorin $\hat{\mathbf{H}}$ kanssa, jolloin saadaan

$$\hbar \hat{\mathbf{H}} \times \dot{\mathbf{k}} + eE \hat{\mathbf{H}} \times \hat{\mathbf{E}} = -\frac{eH}{c} \dot{\mathbf{r}}_\perp.$$

Integroidaan tästä $\mathbf{r}_\perp$:

$$\mathbf{r}_\perp(t) - \mathbf{r}_\perp(0) = -\frac{\hbar c}{eH} [\mathbf{H} \times (\mathbf{k}(t) - \mathbf{k}(0))] + \mathbf{w}t,$$

missä

$$\mathbf{w} = \frac{cE}{H} (\hat{\mathbf{E}} \times \hat{\mathbf{H}}).$$

Hiukkasen liike magneettikenttää vastaan kohtisuorassa tasossa on siis pelkän magneettikentän aiheuttaman liikkeen ja vakionopeuksisen ($\mathbf{w}$ on ns. *ajelehtimisnopeus*, *drift velocity*) liikkeen superpositio.

Jos sähkö- ja magneettikentät ovat kohtisuorassa toisiaan vastaan, ts.

$$\mathbf{E} = -\frac{E}{H} (\hat{\mathbf{E}} \times \hat{\mathbf{H}}) \times \mathbf{H} = -\frac{1}{c} \mathbf{w} \times \mathbf{H},$$

voidaan liikeyhtälö kirjoittaa muotoon

$$\hbar \dot{\mathbf{k}} = -\frac{e}{c\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \bar{\mathcal{E}} \times \mathbf{H},$$

missä

$$\bar{\mathcal{E}}(\mathbf{k}) = \mathcal{E}(\mathbf{k}) - \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{w}.$$

Tämä liikeyhtälö on täsmälleen sama kuin pelkän magneettikentän tapauksessa edellyttäen, että alkuperäinen vyö rakenne $\mathcal{E}(\mathbf{k})$ korvataan vyöllä $\bar{\mathcal{E}}(\mathbf{k})$. Liikeradat k -avaruudessa ovat siis energian $\bar{\mathcal{E}}$ vakiopintojen ja magneettikenttää vastaan kohtisuorien tasojen leikkauskäyriä.

Hall-ilmiö voimakkaissa magneettikentissä

Tarkastellaan magneettikenttiä, joiden voimakkuus on 1T tai enemmän. Koska tyypilliset aaltovektorit ovat suuruudeltaan korkeintaan $1/a_0$, nähdään, että

$$\hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{w} < \frac{\hbar}{a_0} c \frac{E}{H} = \left(\frac{e^2}{a_0} \right) \left(\frac{eEa_0}{\hbar \omega_c} \right).$$

Koska eEa_0 on korkeintaan kertalukua 10^{-10} eV ja 1 teslan kentässä $\hbar \omega_c$ on $\approx 10^{-4}$ eV, on $\hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{w}$ kertalukua 10^{-6} Ry. Vyöenergiat $\mathcal{E}(\mathbf{k})$ ovat yleensä kohtuullisia Rydbergin murto-osia. Nähdään siis, että ainakin suurissa magneettikentissä modifioituneet energiat $\bar{\mathcal{E}}(\mathbf{k})$ ovat likimain samoja kuin vyöenergiat $\mathcal{E}(\mathbf{k})$.

Oletetaan siis, että $\bar{\mathcal{E}}(\mathbf{k}) = \mathcal{E}(\mathbf{k})$. Magneettikentän ja vyön miehityksen perusteella saadaan kaksi tapausta:

1. *Kaikki miehittyjä (tai kaikki miehittämättömiä) tiloja vastaavat liikeradat ovat k-avaruudessa suljettuja.*

Oletetaan, että magneettikenttä on niin suuri ja näyte niin puhdas, että $\omega_c \tau \gg 1$, ts. törmäysten välillä rata ehditään kiertämään useita kertoja.

Olkoon

$$\mathbf{j} = -nev$$

virtatiheys hetkellä $t = 0$. Tässä $\mathbf{v}$ on miehitettyjen tilojen yli laskettu keskimääräinen elektronin nopeus. Koska edellisestä törmäyksestä on kulunut keskimäärin aika τ , elektroni on voinut käyttää ajan τ tämän nopeuden saavuttamiseksi. Liiketyhtälöiden perusteella on

$$\frac{\mathbf{r}_\perp(0) - \mathbf{r}_\perp(-\tau)}{\tau} = -\frac{\hbar c}{eH} \hat{\mathbf{H}} \times \frac{\mathbf{k}(0) - \mathbf{k}(-\tau)}{\tau} + \mathbf{w}.$$

Vasemman puolen termi on ilmeisestikin nopeuden $\mathbf{v}$ projektio magneetikenttää vastaan kohtisuoralla tasolla. Koska radat k -avaruudessa olivat suljettuja, on suure $\mathbf{k}(0) - \mathbf{k}(t)$ rajoitettu ajan funktio. Liikkeen periodin T ollessa pieni verrattuna relaksaatioaikaan τ virtatiheys määräytyy pelkästään ajelehtimisnopeudesta $\mathbf{w}$, sillä

$$\lim_{\tau/T \rightarrow \infty} \mathbf{j}_\perp = -nec\mathbf{w} = -\frac{nec}{H}(\mathbf{E} \times \hat{\mathbf{H}}).$$

Jos kaikkien miehittämättömien tilojen liikeradat ovat k -avaruuden suljettuja käyriä, saadaan vastaavasti

$$\lim_{\tau/T \rightarrow \infty} \mathbf{j}_\perp = +\frac{nhec}{H}(\mathbf{E} \times \hat{\mathbf{H}}).$$

Ratojen ollessa suljettuja Lorentz-voiman aiheuttama liikkeen kiertymä estää elektroneja ottamasta energiaa sähkökentästä niin tehokkaasti, että dominoivaksi kontribuutioksi virtatiheyteen jää vain sähkökenttää vastaan kohtisuora ajelehtimisnopeus $\mathbf{w}$. Hall-kerroin R_H määriteltiin, siten että

$$R_H = \frac{E}{j_\perp H},$$

missä $j_\perp$ on virtatiheyden magneetti- ja sähkökenttää vastaan kohtisuorassa oleva komponentti. Suuren magneettikentän rajalla virran kuljettajien sijaitessa yhdellä vyöllä ja k -avaruuden ratojen ollessa suljettuja on siis

$$R_\infty = \begin{cases} -\frac{1}{nec}, & \text{elektronit} \\ +\frac{1}{nhec}, & \text{aukot} \end{cases}$$

Jos virran kuljettajat sijaitsevat useammilla vöillä (radat silti suljettuja), ovat yo. yhtälöt edelleen voimassa kullekin vöille erikseen. Kokonaisvirta saadaan siis laskemalla yhteen eri vöiden aiheuttamat virrat. Hall-kertoimeksi tulee tällöin

$$R_\infty = -\frac{1}{n_{\text{eff}}ec},$$

missä n_{eff} on elektronien ja aukkojen tiheyden erotus.

2. *Osa k-avaruuden liikeradoista on avoimia.* Näillä radoilla magneettikenttä ei enää pakota liikettä

periodiseksi, eikä aaltovektorin törmäysten jälkeinen muutos ole enää rajoitettu, vaan kasvaa nopeudella, joka on suoraan verrannollinen magneettikentän voimakkuuteen H . Liikeradan yhtälöstä

$$\begin{aligned} & \frac{\mathbf{r}_\perp(0) - \mathbf{r}_\perp(-\tau)}{\tau} \\ &= -\frac{\hbar c}{eH} \hat{\mathbf{H}} \times \frac{\mathbf{k}(0) - \mathbf{k}(-\tau)}{\tau} + \frac{eE}{H}(\hat{\mathbf{E}} \times \hat{\mathbf{H}}) \end{aligned}$$

nähdään, että magneettikentän kasvaessa oikean puolen ensimmäinen termi lähestyy magneettikentästä riippumatonta vakiota toisen termin lähestyessä nollaa. Olkoon $\hat{\mathbf{n}}$ tätä avointa rataa vastaavan liikkeen yleinen suunta r -avaruudessa, ts. vektori $\mathbf{r}_\perp(0) - \mathbf{r}_\perp(-\tau)$ on vektorin $\hat{\mathbf{n}}$ suuntainen, kun $H \rightarrow \infty$. On siis luontevaa jakaa indusoitunut virta kahteen komponenttiin:

$$\mathbf{j} = \sigma^{(0)}(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{E})\hat{\mathbf{n}} + \sigma^{(1)} \cdot \mathbf{E}.$$

Tässä $\sigma^{(0)} \rightarrow$ vakio ja $\sigma^{(1)} \rightarrow 0$, kun $H \rightarrow \infty$.

Olkoon $\hat{\mathbf{n}}'$ yksikkövektori, joka on kohtisuorassa magneettikenttää $\mathbf{H}$ ja radan suuntaa $\hat{\mathbf{n}}$ vastaan, ts. $\hat{\mathbf{n}}' = \hat{\mathbf{n}} \times \hat{\mathbf{H}}$. Hajoitetaan $\mathbf{E}$ (oletuksen mukaan $\mathbf{E} \perp \mathbf{H}$) komponentteihin, kuten

$$\mathbf{E} = E^{(0)}\hat{\mathbf{n}}' + E^{(1)}\hat{\mathbf{n}}.$$

Virtatiheys suurilla magneettikentillä on

$$\mathbf{j} = \sigma^{(0)}E^{(1)}\hat{\mathbf{n}} + E^{(0)}\sigma^{(1)} \cdot \hat{\mathbf{n}}'.$$

Virran projektio suuntaan $\hat{\mathbf{n}}'$ on

$$\hat{\mathbf{n}}' \cdot \mathbf{j} = E^{(0)}\hat{\mathbf{n}}' \cdot \sigma^{(1)} \cdot \hat{\mathbf{n}}',$$

joten

$$\frac{E^{(0)}}{j} = \frac{\hat{\mathbf{n}}' \cdot \hat{\mathbf{j}}}{\hat{\mathbf{n}}' \cdot \sigma^{(1)} \cdot \hat{\mathbf{n}}'}.$$

Jos koetilanne on sellainen, että suurilla magneettikentillä indusoitunut virta ei ole liikkeen suuntainen, täytyy komponentin $E^{(0)}$ lähestyä vakiota ja komponentin $E^{(1)}$ nollaa magneettikentän kasvaessa. Magnetoresistanssi määriteltiin sähkökentän virran suuntaisen komponentin ja virtatiheyden suhteeksi:

$$\rho = \frac{\mathbf{E} \cdot \hat{\mathbf{j}}}{j}.$$

Tässä tapauksessa on siis

$$\rho = \left(\frac{E^{(0)}}{j} \right) \hat{\mathbf{n}}' \cdot \hat{\mathbf{j}} = \frac{(\hat{\mathbf{n}}' \cdot \hat{\mathbf{j}})^2}{\hat{\mathbf{n}}' \cdot \sigma^{(1)} \cdot \hat{\mathbf{n}}'}.$$

Koska $\sigma^{(1)}$ häviää suurilla kentillä, kasvaa magnetoresistanssi rajatta magneettikentän kasvaessa.

Bloch-oscillaatiot

Tarkastellaan yksiulotteista hilaa tiukan sidoksen aproksimaatiossa. Diskreetin mallin mukainen energiaspektri on

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(\mathbf{k}) &= U + \eta \sum_{\delta} e^{i\mathbf{k} \cdot \delta} = U + \eta (e^{ika} + e^{-ika}) \\ &= U + 2\eta \cos ak, \end{aligned}$$

kun a on kiteen hilavakio. Semiklassisten liikeyhtälöiden

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{r}} &= \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \mathcal{E}_n(\mathbf{k}) \\ \hbar \dot{\mathbf{k}} &= -e \left[\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{c} \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) \right]\end{aligned}$$

mukaan elektroni liikkuu nyt noudattaen yhtälöitä

$$\begin{aligned}\dot{r} &= \frac{1}{\hbar} \frac{\partial}{\partial k} \mathcal{E}(k) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial}{\partial k} (U + 2\eta \cos ak) \\ &= -\frac{2a\eta}{\hbar} \sin ak \\ \hbar \dot{k} &= -eE,\end{aligned}$$

kun kide on staattisessa sähkökentässä E .

Olettaen, että hetkellä $t = 0$ elektronin aaltovektori on $k = 0$, on jälkimmäisen yhtälön ratkaisu

$$k = -\frac{1}{\hbar} eEt.$$

Sijoitetaan tämä ensimmäiseen yhtälöön ja saadaan

$$\dot{r} = v = -\frac{2a\eta}{\hbar} \sin \frac{aeEt}{\hbar}.$$

Alkuehdon $r(0) = 0$ toteuttava ratkaisu on

$$r(t) = \frac{2\eta}{eE} \cos \frac{aeEt}{\hbar}.$$

Näyttäisi siltä, että ulkoisen staattisen sähkökentän vaikutuksesta elektroni oskilloisi tasapainoasemansa ympärillä, sitä pienemmällä amplitudilla mitä suurempi kenttä. Suurilla ajoinilla staattisilla kentillä metallista pitäisi siis tulla eriste. Näin ei kuitenkaan koskaan käy, sillä metalleissa elektronien relaksaatioajat (törmäysten välit) ovat erittäin lyhyitä verrattuna aikaan, jonka aaltovektori tarvitsisi energiavyön periodin läpikäyntiin.