热电子发射计算

这部分感觉跟我们最关心的电导没啥直接联系，不知道为啥放在第六章开头。总之先过一遍。

回顾经典近似，电子作为粒子处于势阱中，其速度分布是：

$$dn = n_0 \left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{mv^2}{2k_B T}} d\vec{v}$$

代表处于$\vec{v} \to \vec{v} + d\vec{v}$的电子数$dn$。于是当电子$v_x$方向速度能量大于$\chi$，电子发生逃逸，此时对应的逃逸速度就是电流里的速度 ，即$j = nes\vec{v}$，由此代入n的表达式并积分，就是

$$j = n_0 \left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right)^{\frac{3}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} dv_y \int_{-\infty}^{\infty} dv_z \int_{\frac{v_x^2}{2m} > \chi}^{\infty} (-qv_x) e^{-\frac{mv^2}{2k_B T}} dv_x$$

不过不知道为啥这里逃逸速度不扣一份能量？因为逃逸过后理论上应该v_x应该减小了才对?算了不管了，完成积分得：

$$j = -n_0 q \left(\frac{k_B T}{2\pi m}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{\chi}{k_B T}}$$

说明热发射电流随T的变化规律，这与实验观测相符，形式为$e^{-\frac{W}{k_B T}}$，并可解释为功函数$W \sim \chi$（势阱深度 ）。

而实际上电子是量子化的，其分布不再服从上述麦氏分布。

考虑能带$E(\vec{k}) = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$，$\vec{v}(\vec{k}) = \nabla_k \frac{1}{\hbar} E = \frac{\hbar \vec{k}}{m}$

则处在波矢$d\vec{k} = dk_x dk_y dk_z$内量子态数为$2 \cdot \frac{V}{(2\pi)^3} d\vec{k}$，并且由于我们要跟经典的速度对比，因此要把波矢$\vec{k}$利用上面的关系式替换成$\vec{v}$，则：

$$\frac{2V}{(2\pi)^3} d\vec{k} = 2V \left(\frac{m}{2\pi\hbar}\right)^3 d\vec{v}$$

对应的权重则是$f(E)$费米分布，统计平均电子数：

$$dn = 2\left(\frac{m}{2\pi\hbar}\right)^3 \frac{1}{e^{\frac{(\frac{1}{2}mv^2 - \mu)}{k_B T}} + 1} d\vec{v}$$

由于$f(E)$的性质，$\frac{1}{2}mv^2$且高于χ一点点，就会导致指数远大于1，因此忽略分母上的1，故电子数：

$$dn = 2\left(\frac{m}{2\pi\hbar}\right)^3 e^{\frac{\mu}{k_BT}} e^{-\frac{mv^2}{2k_BT}} d\vec{v}$$

然后作类似积分得：

$$j = -\frac{4\pi m(k_BT)^{\frac{3}{2}} q}{(2\pi\hbar)^3} e^{\frac{-(\chi-\mu)}{k_BT}}$$

这个形式与之前经典理论的结果是一致的，但对功函数W的解释为$\chi - \mu$。

电导率相关推导（基于量子态与分布函数）

下面我们用$f(E)$对电子输运讨论，以期望能对电导电流作出解释，即解释$\vec{j} = \sigma\vec{E}$，并且给出σ的意义。 最终的结论可以解释σ与温度成正比（一般温度下）、与温度$T^{\frac{5}{2}}$成比（极低温下 ）。

这一部分很长，难度还是会有的，同时各自理论近似是有点意思的。总之开始

我们已知在$\vec{k}$到$\vec{k} + d\vec{k}$范围波矢的粒子数是：

$$\frac{2V}{(2\pi)^3} d\vec{k}$$

之前也说过，那么乘上费米分布， 处在能量$E(\vec{k})$能量区域的平均粒子数则为：

$$\frac{2V}{(2\pi)^3} f_F(E(\vec{k}), T) d\vec{k}$$

每个$\vec{k}$自然会对应第5章讨论过的“准经典速度”，表征电子在实空间的速度$\vec{v}(\vec{k})$，因此速度的期望就是：

$$\int \frac{2V}{(2\pi)^3} f_F(E(\vec{k}), T) \cdot \vec{v}(\vec{k})\, d\vec{k}$$

在无外场时，$E(\vec{k}) = E(-\vec{k})$，又因波矢$\vec{k}$是均匀对称的取值，故由之前讨论，正$\vec{k}$和负$\vec{k}$总是等权重，抵消，上述“速度期望值”自然是零；而速度期望自然是电流的表达：

$$\vec{j} = -2q \int \frac{f_F(E(\vec{k}), T)\, \vec{v}(\vec{k})}{(2\pi)^3} d\vec{k}$$

这里电流的表达式乘了电荷$-q$、并且与课本一致取了单位体积（除以V）。总之对于这个电流的表达式，尽管具体形式未知，但我们已经知道在无外场的情况下，积分结果是零，无电流，这符合我们的常识。

那问题就来到：添加外场后，我们的分布不再是平衡体系下的费米分布，此时我们记分布函数为$f(\vec{k}, t)$，含时是因为外场加的时间会导致分布函数进一步变化，用波矢作为函数而不是能量E是因为此时不再是费米分布(费米分布只看波矢对应的能量)，自然要退化到研究具体的波矢矢量的取值，同时此时积分

应该无法正负相消，那么$\vec{j}$电流就不是零。越大的外场$\vec{E}$会使分布越偏离对称，因此我们期望找到$\vec{j}$，关于外场E的变化规律，这就是电导率的定义σ。

由此为了进行进一步的研究，我们的假设是：处在$\vec{k}$状态的粒子，会因外场在$\vec{k}$空间平移：

$$\frac{d\vec{k}}{dt} = -\frac{q\vec{E}}{\hbar}$$

此外，电子间可能产生碰撞（散射机制），使之回归“原始”的$\vec{k}$。这两种机制的相互作用，就产生了电子在实空间的定向加速运动然后重置然后再加速。假设碰撞周期为τ，那么这段过程，$\vec{k}$空间的分布整体平移是：

$$\int_0^\tau \frac{d\vec{k}}{dt}dt = \int_0^\tau -\frac{q\vec{E}}{\hbar}dt = \tau\left(-\frac{q\vec{E}}{\hbar}\right)$$

则这就是电场对“对称分布$\vec{k}$的破坏程度”，除了按照上述用平移进行理解，我们更常认为，这是对费米面附近的电子的置换。即认为这种作用是把负方向费米波矢$-\vec{k}_0$附近的电子大量抽出来放到对应正方向的费米波矢$\vec{k}_0$附近，举个例子就是，一个[-5,5]的均匀分布，将其平移成为[-3,7]均匀分布，一方面可以认为是平移，但是另一方面这也是把-3$_{\text{-5的值抽出来放到了5}}$7这个范围，如果这个例子是均值0标准差5的高斯分布被移动到均值3标准差5的高斯分布，这个例子也是一样的，同样地这个理解对更高维度也是成立的，因此我们说上述对电子分布的影响是对费米面附近电子的抽取。若体系不止电场，还有磁场，那么此时波矢的变化公式额外添加磁场受力：

$$\frac{d\vec{k}}{dt} = \frac{1}{\hbar}\left\{-q\vec{E} - q\left[\frac{1}{\hbar}\nabla_k E(\vec{k}) \times \vec{B}\right]\right\}$$

至此，我们的定性研究已经差不多了。我们来进一步定量研究这个问题。我们的核心落在外场下，费米分布函数无法满足我们的需求，我们转而研究更广义的波矢$\vec{k}$的分布函数$f(\vec{k},t)$随时间(和外场)的变化上，假设一开始的分布函数的形式我们已经拿到了，而每个点的波矢的后续演化$\frac{d\vec{k}}{dt}$我们也拿到了，那么此时我们应该是可以完成对分布函数(相当于一个泛函)的函数形式的演化求解的。这本质上是一个“流体力学”求密度函数演化的问题，其表述是这样的，一个流体在空间各点密度随空间的分布记作$\rho(\vec{r},t)$，在已有$\vec{r}$状态的运动$\frac{d\vec{r}}{dt}$公式的情况下，求出分布$\rho(\vec{r},t)$的变化式。

这这类问题的解是早已研究过的，可以由**连续性原理**给出：

$$\frac{\partial f(\vec{k}(t),t)}{\partial t} = -\frac{d}{d\vec{k}}\left[f(\vec{k}(t),t)\frac{d\vec{k}}{dt}\right]$$

这个式子不是从链式法则展开而来的，而是从流量角度来的，要这么推导

连续性原理

考虑流体在**三维实空间**中流动，流体的密度场为$\rho(\vec{r},t)$（单位体积内的质量，$\vec{r}$是空间位置矢量，t是时间），流体元的速度场为$\dot{\vec{r}}=\frac{d\vec{r}}{dt}=\vec{v}(\vec{r},t)$（单位时间内流体元的位移）。

在流体中选取一个**固定的控制体**（空间区域），其体积为V，闭合表面积为S。

控制体内的质量$M(t)$可表示为密度在体积内的积分：

$$M(t)=\iiint_V \rho(\vec{r},t)\,dV$$

这一区域的质量随时间的变化率为：

$$\frac{dM}{dt}=\frac{\partial}{\partial t}\iiint_V \rho(\vec{r},t)\,dV=\iiint_V \frac{\partial \rho}{\partial t}\,dV$$

而流体通过控制体表面S的质量通量（单位时间内流过单位面积的质量）为$\vec{J}=\rho\vec{v}$（密度×速度，类比"单位面积流量"）。根据通量的定义，单位时间内**流出**控制体的总质量等于"通量$\vec{J}$穿过表面积S的积分"，即：

$$\text{流出质量速率}=\iint_S \vec{J}\cdot d\vec{S}=\iint_S (\rho\vec{v})\cdot d\vec{S}$$

其中$d\vec{S}$是表面积元矢量，方向沿表面外法线。

根据**质量守恒定律**：控制体内质量的变化率$=-$单位时间内流出控制体的质量（负号表示"流出导致内部质量减少"）。因此有：

$$\iiint_V \frac{\partial \rho}{\partial t}\,dV=-\iint_S (\rho\vec{v})\cdot d\vec{S}$$

利用高斯散度定理，将面积分转换为体积分（散度定理：$\iint_S \vec{A}\cdot d\vec{S}=\iiint_V \nabla\cdot\vec{A}\,dV$），右边可改写为：

$$-\iiint_V \nabla\cdot(\rho\vec{v})\,dV$$

于是方程变为：

$$\iiint_V \frac{\partial \rho}{\partial t}\,dV=-\iiint_V \nabla\cdot(\rho\vec{v})\,dV$$

由于控制体V是**任意选取**的（对空间中任意区域都成立），积分号内的被积函数必须相等，因此得到：

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0$$

这就是**流体力学中连续性方程的微分形式**，它描述了流体密度场随时间的演化与速度场散度的关系，是“连续性原理”的数学表述。

玻尔兹曼方程

在**波矢空间**$\vec{k}$ 问题中，分布函数$f(\vec{k},t)$可类比“密度”（单位波矢体积内的粒子数），$\frac{d\vec{k}}{dt}$类比“速度”（波矢空间中流体元的运动速率 ）。

因此完全同理，对应的连续性原理，结论正是：

$$\begin{aligned}\frac{\partial f(\vec{k}(t),t)}{\partial t} &= -\frac{d}{d\vec{k}}\left[f(\vec{k}(t),t)\frac{d\vec{k}}{dt}\right] \\ &= -\frac{d\vec{k}}{dt}\cdot\nabla_k f(\vec{k},t) - f(\vec{k},t)\nabla_k\left(\frac{d\vec{k}}{dt}\right)\end{aligned}$$

其中第二行是把第一行链式法则展开，注意一下矢量之间的关系，第一项是分布函数被偏导成为了一个矢量然后与波矢变化点乘，第二项是波矢变化被取散度再跟分布函数数乘。并且，代入波矢变化公式$\frac{d\vec{k}}{dt}$可得第二项为零（ 因为$\frac{d\vec{k}}{dt}$里面电场部分与$\vec{k}$无关，这部分求散度为零，第二部分磁场自带一个波矢方向相关的的叉乘，再取波矢的散度也为零 ），于是分布函数只剩下第一项，变化为：

$$\frac{\partial f(\vec{k},t)}{\partial t} = -\frac{d\vec{k}}{dt}\cdot\nabla_k f(\vec{k},t)$$

若有“温度梯度”，f还与位置$\vec{r}$有关，上式需扩展，但我们暂时聚焦电导率的问题，回到核心。 这个式子的意义是描述外场下波矢的漂移，但问题也出现，此时我们暂时还没考虑到散射碰撞涉及的问题，而是只考虑了外场下波矢的加速，而显然波矢应当是会互相干涉的

碰撞项的假设

因此现在要加入“碰撞项”，考虑一个**几率函数**$\Theta(\vec{k},\vec{k}')$，表示从处于状态$\vec{k}$到状态$\vec{k}'$在单位时间内的跃迁概率。需要注意两个问题，第一个是这个几率函数使用起来，要考虑初态的占据数，如果说初始$\vec{k}$恰好是一个粒子占据，那么问题就简单了， 但是我们又知道统计平均下，在费米面附近可能$\vec{k}$只有0.8个粒子占据，因此对应的几率函数，是应该乘上波矢对应的密度函数的。此外，又因为泡利不相容原理，显然末态的占据数量是1的时候，这个跃迁是必定无法发生的，因此，这个几率应该还要乘上关于末态占据数n的$1-n$。并且第二个问题也是泡利不相容，考虑初态的时候我们可以认为电子取向上向下自旋都行，因此考虑密度函数的时候要乘以2，但是考虑末态的时候，其必定自旋与初态相同，因此对应的密度函数只能乘以1。即此时我们的物理意义“时间δt内，从波矢$\vec{k}$到波矢$\vec{k}'$发生跃迁的粒子数量是”对应的式子是：

$$2f(\vec{k},t)\frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3}\Theta(\vec{k},\vec{k}')\frac{d\vec{k}'}{(2\pi)^3}\left[1-f(\vec{k}',t)\right]\delta t$$

这个式子对一切末态波矢$\vec{k}'$积分，得到“状态$\vec{k}$失去的粒子”(相当于这些粒子散射到了其它$\vec{k}'$态)：

$$\int_{\vec{k}'} f(\vec{k},t)\left[1-f(\vec{k}',t)\right]\Theta(\vec{k},\vec{k}')\frac{d\vec{k}'}{(2\pi)^3}\left(2\frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3}\delta t\right)$$

而从所有其它态$\vec{k}''$来到$\vec{k}$的粒子，类似地只需要对上面的式子调换一下指标，可以写出：

$$\int_{\vec{k}''} f(\vec{k}'',t)\left[1-f(\vec{k},t)\right]\Theta(\vec{k}'',\vec{k})\frac{d\vec{k}''}{(2\pi)^3}\left(2\frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3}\delta t\right)$$

将上面的积分分离一下，取跟积分有关的部分进行新的定义

$$a=\int_{\vec{k}'} f(\vec{k},t)\left[1-f(\vec{k}',t)\right]\Theta(\vec{k},\vec{k}')\frac{d\vec{k}'}{(2\pi)^3}$$

$$b=\int_{\vec{k}'} f(\vec{k}',t)\left[1-f(\vec{k},t)\right]\Theta(\vec{k}',\vec{k})\frac{d\vec{k}'}{(2\pi)^3}$$

对其取差，这就代表在时间δt内，处于状态$\vec{k}$的粒子数的变化：

$$2\delta f(\vec{k},t)\frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3}=(b-a)\left(2\frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3}\delta t\right)$$

把右边的时间除到左边去取极限，自然就得到了状态$\vec{k}$对应的粒子数由碰撞导致的分布变化，等号左右两边的波矢标记是共同的，因此自然对整个密度函数都成立，也就是

$$\frac{\partial f}{\partial t}=(b-a)$$

那么加上之前的“漂移项”，有：

$$\frac{\partial f}{\partial t}=-\left(\frac{d\vec{k}}{dt}\right)\cdot\nabla_k f(\vec{k},t)+(b-a)$$

一般考虑“稳态”下，比如恒定电流的环境下，此时分布就算通电的时候不平衡，但是电流稳定后应该分布处于平衡态，也就是，$\frac{\partial f}{\partial t}=0$，那么有：

$$\left(\frac{d\vec{k}}{dt}\right)\cdot\nabla_k f(\vec{k})=b-a$$

进一步，我们最感兴趣的是**电导率**，则用外加电场时的波矢变化公式$\frac{d\vec{k}}{dt}=-\frac{q\vec{E}}{\hbar}$，代入得：

$$-\frac{q\vec{E}}{\hbar}\cdot\nabla_k f(\vec{k})=b-a$$

此时已经初见端倪，这个式子对于给定的电场$\vec{E}$，当然会有一个解 f，这个解关于波矢是非对称的，乘上波矢对应的速度取积分，就会对应之前讨论过的电流，由此只要我们拿到 f关于$\vec{E}$的表达式，就拿到了$\vec{j}$关于$\vec{E}$的表达式，由此对应的相关因子就是我们想要的电导率。因此问题来到这里的求解。首先这个方程左边是 f的微分，右边是 f的积分，这其实求解起来难度很大，其次$b-a$的具体形式还会依赖于散射因子，我们对此还是一无所知的。

弛豫时间近似

因此，这相当于两个问题，一个是求解微分积分方程，一个是散射因子的形式对解的影响。我们先暂且忽略后者，重心放在前者求解上，因此我们假设积分方程已经做好，即

$$b-a=-\frac{f-f_0}{\tau(\vec{k})}$$

认为此时$b-a$变为一个只跟$f-f_0$表示f偏离平衡态f_0(平衡态就是标准的费米分布，见下文)的程度，以及弛豫时间$\tau(\vec{k})$有关的函数，这称为弛豫时间近似。这样做的好处是，在未知散射因子具体形式时，可以先着手讨论方程解

$$-\frac{q}{\hbar}\vec{E}\cdot\nabla_k f(\vec{k})=-\frac{f-f_0}{\tau}$$

显然在稳定的情况下，比如恒定电流，分布函数的形式是受到电场影响的，因此将f按电场$\vec{E}$的级数展开，得

$$f=f_0+f_1+f_2+\cdots$$

当然了这里的零级自然对应不受电场影响的分布函数，也就是外场设置为$\vec{E}=0$的情况下会有$f=f_0$，这当然就对应了平衡的费米分布，那么$f-f_0$自然就表示f偏离参考费米平衡态的程度。总之将其代入方程

$$-\frac{q}{\hbar}\vec{E}\cdot\nabla_k f_0-\frac{q}{\hbar}\vec{E}\cdot\nabla_k f_1+\cdots=-\frac{f_1}{\tau}-\frac{f_2}{\tau}+\cdots$$

其中f_0是因$\vec{E}$的零次幂，$\vec{E}$乘f_0则是一次幂，因此对于左右两边，同次幂要相等,有

$$\begin{cases}\frac{f_1}{\tau}=\frac{q}{\hbar}\vec{E}\cdot\nabla_k f_0\\ \frac{f_2}{\tau}=\frac{q}{\hbar}\vec{E}\cdot\nabla_k f_1\end{cases}$$

对上面第一式移项，并利用f_0是平衡态费米分布，其是能带E的函数，而E是k的函数，于是链式法则展开得到

$$\begin{aligned} f_1 &= \frac{q\tau}{\hbar}\vec{E}\cdot\nabla_k f_0 \\ &= \frac{q\tau}{\hbar}\vec{E}\cdot\left(\frac{dE(\vec{k})}{d\vec{k}}\frac{\partial f_0}{\partial E}\right) \\ &= q\tau\vec{E}\cdot\vec{v}(\vec{k})\frac{\partial f_0}{\partial E} \end{aligned}$$

其中还利用了$\frac{1}{\hbar}\nabla E(\vec{k})=\vec{v}(\vec{k})$。而假设电场是弱场，那么$f$只保留到关于$\vec{E}$的一阶，即忽略高次项，这显然是合理的，则此时$f=f_0+f_1$，上面已解出了$f_1$的表达式，而$f_0$是费米分布，因此往电流的表达式代入

$$\begin{aligned} \vec{j} &= -e\int 2f\vec{v}(\vec{k})\frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} \\ &= -q\int 2f_0\vec{v}(\vec{k})\frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} - q\int 2f_1\vec{v}(\vec{k})\frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} \end{aligned}$$

其中因f_0代表费米分布平衡态，显然其平衡电流为零，再把f_1代入，有

$$\vec{j} = -2q^2\int \tau\vec{v}(\vec{k})[\vec{v}(\vec{k})\cdot\vec{E}]\frac{\partial f_0}{\partial E}\frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3}$$

这个式子就可以对应微观欧姆定律了$\vec{j}=\overleftrightarrow{\sigma}\cdot\vec{E}$只需把上式取分量，我们要满足的式子是

$$j_\alpha = \sum_\beta \sigma_{\alpha\beta}E_\beta$$

因此对应的分量就是

$$\sigma_{\alpha\beta} = -2q^2\int \tau(\vec{k})v_\alpha(\vec{k})v_\beta(\vec{k})\frac{\partial f_0}{\partial E}\frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3}$$

这样，我们就有了一个大概的解释电导率的理论，其中特别值得注意的是，尽管我们一开始的假设是对分布函数f进行电场的幂级数展开$f=f_0+f_1+\cdots$，但是利用完这个展开后，因为我们只用了弱场近似，只保留了f_0(电场无关项),f_1(电场有关项，但是利用电场幂相等的表达式，将其替换成了f_0对能量的求导),因此我们最后这里，$\frac{\partial f_0}{\partial E}$是平衡态费米分布函数对能量的求导，而不是对电场的求导，这相当于是一个高斯函数δ函数，因此对应的积分最终结果只会保留在费米面附近的取值。此外我们看到根据上述的结果，假设电场$\vec{E}=(E_x,0,0)$只沿x方向，也可能有其他方向的电流$\vec{j}=(j_x,j_y,j_z)$，这跟我

们初高中接触的好像有点不太一样，因为感觉生活中的常识是，对一个方向通电只会引起这个方向的电流。但这是可以解释的，因为日常中用的一般是各向同性材料，此时能带$E(\vec{k})$与$\vec{k}$的方向无关，即

$$E(\vec{k})=\frac{\hbar^2k^2}{2m^*}$$

只与能带顶或者导带底有效质量有关(关于这个形式，这其实是一个合理的近似，认为任意的能带总可以在参考的导带顶或者价带底对应的波矢$\vec{k}_0$附近进行展开，此时一阶展开系数为零，二阶展开系数就是倒有效质量就是这里的项，这是可以实验获取的，因此这个近似是有一些道理的，具体的讨论可以见下一章，读者只需要接受这个形式虽然看上去用了自由电子近似，不符合实际情况，但是实际上这里有有效质量修正，是合理的就行)，总之此时能带对波数矢量$\vec{k}$的响应是各向同性的

则速度的表达式是$v_\alpha=\frac{1}{\hbar}\frac{\partial E(\vec{k})}{\partial k_\alpha}=\frac{\hbar k_\alpha}{m^*}$同理对于$v_\beta$，于是代入

$$\sigma_{\alpha\beta}=-2q^2\int\left(\frac{\hbar^2}{m^{*2}}\right)k_\alpha k_\beta\tau(\vec{k})\frac{\partial f_0}{\partial E}\frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3}$$

各向同性时$\tau(\vec{k})$也与方向无关，因此积分中，所有项，除k_α,k_β外都是球对称的。因此讨论这个k空间的积分，其实跟讨论坐标空间的$\int xydxdydz$、$\int x^2dxdydz$,$\int yzdxdydz$等积分是一样的。当且仅当这里取x^2,y^2,z^2时积分不为零，因此我们k空间的积分，当然也有当且仅当取k_x^2,k_y^2,k_z^2时积分不为零，并且显然这三个积分结果是一样的，因此$\sigma_{11}=\sigma_{22}=\sigma_{33}=\sigma$，对应的电导率张量此时变为一个对角元都相等的对角阵。自然，此时i方向电场也确实只带来i方向的电流j

进一步的我们计算出对角元的值，考虑到有$\sigma_{11}=\sigma_{22}=\sigma_{33}=\frac{\sigma_{11}+\sigma_{22}+\sigma_{33}}{3}$，即代入有

$$\begin{aligned}
\sigma_0&=-\frac{2q^2}{3}\int\frac{\hbar^2}{m^{*2}}(k_1^2+k_2^2+k_3^2)\tau(\vec{k})\frac{\partial f_0}{\partial E}\frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3}\\
&=\frac{2q^2}{3}\int\frac{\hbar^2k^2}{m^{*2}}\tau(\vec{k})\left(-\frac{\partial f_0}{\partial E}\right)\frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3}\\
&=\frac{2q^2}{3}\int\frac{\hbar^2}{m^{*2}}k_r^2\tau(k_r)\left(-\frac{\partial f_0}{\partial E}\right)k_r^2k_\theta\frac{dk_rd\theta d\varphi}{(2\pi)^3}\\
&=\frac{8\pi q^2}{3}\int\frac{\hbar^2}{m^{*2}}k_r^4\tau(k_r)\left(-\frac{\partial f_0}{\partial E}\right)\frac{dk_r}{(2\pi)^3}\\
&=\frac{q^2}{3\pi^2m^*}\int\left[k_r^3\tau(k_r)\right]\left(-\frac{\partial f_0}{\partial E}\right)dE
\end{aligned}$$

其中利用球坐标了球坐标的展开将积分换为了对径向k_r的积分，其余角度部分直接积成4π，倘若考虑最后一步这里的费米函数对能量的求导视为一个狄拉克函数，那么这个积分就变为方括号在费米面处的取值E_F，则有

$$\sigma = \frac{q^2}{m^*} \cdot \frac{k_F^2}{3\pi^2} \tau(k_F)$$

进一步谈论这个公示的化简，利用到自由电子的费米面的定义有

$$k_F = \left(3\pi^2 \frac{N}{V}\right)^{\frac{1}{3}}$$

代入得

$$\sigma_0 = \frac{N}{V} \cdot \frac{q^2 \tau(E_F)}{m^*} = \frac{n q^2 \tau(E_F)}{m^*}$$

这样我们就拿到了各项同性材料的电导率的定义，这跟经典理论求出来的电子电导率形式是有一定相似度的，具体的讨论笔者不会。但是总之我们的目标是达到了，因为一开始我们就说这一章要拿到电导率的表达式，我们确实做到了，并且这个式子是各向同性的材料，也对应我们生活中常用的材料，因此我们的任务可以说是还完成的不错，至于这里具体的弛豫时间的表达式，以及倒有效质量作为一个近似，是不是好的，合理的，以及如何实验测定，要看后续的内容以及第七章的内容。