

## **Неделя 5. Кинетические и электрические явления в твёрдых телах и металлах.**

Здесь приводятся решения задач для разбора на семинаре для лекционного потока ФОПФ, 6 семестр, 2017-2018 уч.год. О замеченных опечатках, ошибках и неточностях просьба сообщать В.Н.Глазкову [vglazkov@yandex.ru](mailto:vglazkov@yandex.ru)

### **Оглавление**

Неделя 5. Кинетические и электрические явления в твёрдых телах и металлах.....	1
Задача 3.65 .....	1
Задача 3.75.....	2
Задача 3.9 .....	3
Задача Т.5.1 .....	4
Задача 3.74.....	5

### **Задача 3.65**

*Характерная величина удельного сопротивления металлов при комнатной температуре  $\rho = 10^{-5}$  Ом·см . Оценить длину свободного пробега  $\Lambda$  , приняв постоянную решётки равной  $a = 3\text{Å}$  .*

*Решение:*

Используем формулу Друде для проводимости  $\sigma = \frac{ne^2\tau}{m}$  . Для перехода к требуемым в условии величинам подставляем  $\Lambda = v_F\tau$  ,  $p_F = mv_F$  и  $p_F = \hbar(3\pi^2n)^{1/3}$  :

$$\frac{1}{\rho} = \sigma = \frac{ne^2\tau}{m} = \frac{ne^2\Lambda}{p_F} = \left(\frac{n}{\pi}\right)^{2/3} \frac{e^2\Lambda}{\hbar\sqrt{3}}$$

Будем считать, что в металле имеется один электрон проводимости на ячейку (случай меди, например), то есть  $n = a^{-3}$  .

Тогда получаем ответ:  $\Lambda = \frac{\hbar 3^{1/3} \pi^{2/3} a^2}{\rho e^2} \approx 1.1 \cdot 10^{-6} \text{ см} = 11 \text{ нм}$  .

Комментарий: в задаче используются внесистемные единицы – Ом·см , перед тем как вычислять по этой формуле, лучше проверить размерность. Формула Друде верна и в СИ и в СГС, в СИ размерность удельного сопротивления Ом·м , в СГС — сек ,

$$1 \text{ Ом} \cdot \text{м} = \frac{1}{9} 10^{-9} \text{ сек} .$$

### Задача 3.75

Удельное сопротивление сплава  $Ag + 1\% Ni$  при  $T \simeq 0$  равно  $\rho = 10^{-6} \text{ Ом}\cdot\text{см}$ . Считая, что это сопротивление определяется только примесными ионами никеля, оценить величину сечения рассеяния электронов на атоме никеля. Серебро кристаллизуется в ГЦК решётку с  $a = 4.1 \text{ \AA}$ .

Решение:

Напомним, что ГЦК решётка — не примитивная, в ней на кубическую элементарную ячейку приходится 4 атома. У серебра единственный валентный электрон, поэтому концентрация электронов равна концентрации атомов серебра.

Нулевая температура в условии задачи означает, что основным каналом рассеяния электронов является рассеяние на примесях. В технически чистых металлах (сплав с 1% примесей это даже довольно «грязный» металл) такой низкотемпературный режим реализуется ниже примерно 10К.

Напомним также, что в металле примесной ион погружен в «море» электронов проводимости, которые экранируют его поле. Потенциал взаимодействия с таким экранированным ионом в рамках локального приближения Томсона-Ферми (см. лекционные материалы) — это экранированный кулоновский потенциал  $\frac{e^{-r/r_0}}{r}$ , где характерный радиус экранирования для металлов порядка атомного. Так что ожидаемым должен быть ответ порядка квадрата атомного размера.

Длина пробега связана с концентрацией рассеивающих центров и сечением рассеяния как  $\Lambda = \frac{1}{s n_{Ni}}$ , где  $s$  — искомое сечение рассеяния, а  $n_{Ni}$  — концентрация рассеивающих центров (атомов никеля). Для относительной концентрации 1%, концентрация рассеивающих центров никеля на атом серебра  $n_{Ni} = 0.01 \frac{4}{a^3}$ . Концентрация электронов проводимости  $n_e = \frac{4}{a^3}$ .

Ферми-поверхность серебра в целом близка к сферической, хотя и имеет «перетяжки» на границе зоны Бриллюэна, поэтому для оценки можно взять величину фермиевской скорости, вычисленной в модели газа свободных электронов:  $\Lambda = v_F \tau = \frac{\hbar}{m} \sqrt{3\pi^2 n_e} \tau$ .

Сводя все эти рассуждения в формулу Друде, получаем:  $\sigma = \frac{n_e e^2 \tau}{m} = \left(\frac{4}{a^3}\right)^{2/3} \frac{\Lambda e^2}{\hbar \sqrt{3\pi^2}}$ .

Окончательно для сечения рассеяния:

$$s = \frac{1}{n_{Ni} \Lambda} = \frac{1}{0.01 \frac{4}{a^3}} \left(\frac{4}{a^3}\right)^{2/3} \frac{e^2}{\sigma \hbar \sqrt{3\pi^2}} = 100 \frac{1}{\sqrt[3]{12\pi^2}} \frac{a e^2}{\sigma \hbar} = 100 \frac{1}{\sqrt[3]{12\pi^2}} \frac{\rho a e^2}{\hbar} \approx 2 \cdot 10^{-16} \text{ см}^2.$$

Как и ожидалось, сечение оказывается порядка атомного.

### Задача 3.9

На какой максимальный угол может отклониться электрон при поглощении или испускании одного фонона в одновалентном металле с простой кубической решёткой, хорошо описываемым моделью Дебая и моделью свободных электронов.

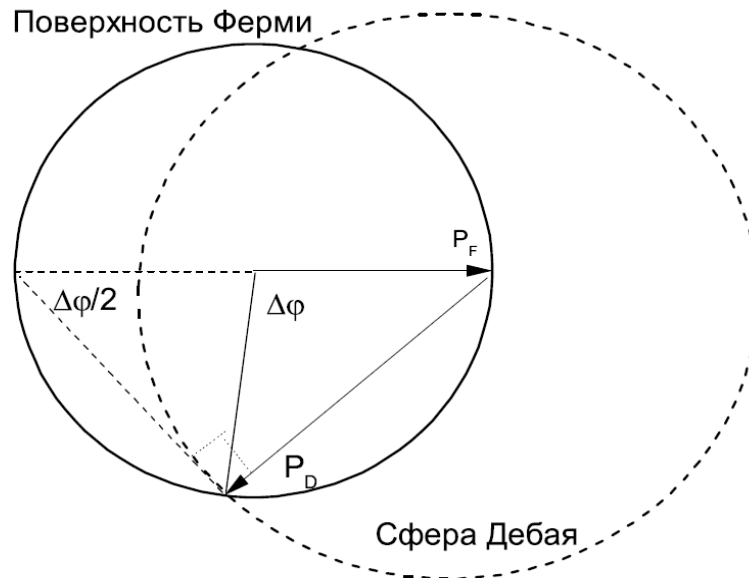


Рисунок 1: К задаче 3.9. Сфера радиусом  $\hbar k_D$  построена из одной из точек ферми-поверхности. Точки пересечения этой сферы с поверхностью Ферми соответствуют максимальным углам отклонения.

Решение:

В одновалентном металле с простой кубической решёткой поверхность Ферми представляет собой сферу радиусом  $k_F = \sqrt[3]{3\pi^2/a} \approx 3.09/a$ , где  $a$  - параметр решётки.

Максимальный импульс фонона в дебаевской модели равен  $\hbar k_D$ . Согласно модели Дебая

$$\frac{4}{3}\pi(k_D)^3 = \frac{(2\pi)^3}{a^3} \quad (\text{полное число мод колебаний одной поляризации для простой решётки}$$

равно числу атомов), откуда  $k_D = \sqrt[3]{6\pi^2/a} \approx 3.90/a$ . Дебаевский импульс оказывается несколько больше фермиевского.

В то же время, максимальная энергия фонона в дебаевской модели равна дебаевской температуре и для металлов является величиной порядка 200К. Энергия Ферми для электронов в нормальном металле порядка нескольких электронвольт, то есть порядка 50000 К.<sup>1</sup> Это означает, что при рассеянии электрона с испусканием или поглощением фонона

<sup>1</sup> Для дебаевской энергии  $k_B \Theta = s \hbar k_D$  и  $\Theta \approx \frac{600 K}{a[\text{Å}]}$ , для вычисления принято  $s = 2 \text{ км/с}$ . Для

фермиевской энергии  $k_B T_F = \frac{\hbar^2}{2m} k_F^2$  и  $T_F \approx \frac{420000 K}{a^2[\text{Å}]}$ . Межатомное расстояние в ангстремах.

исходное и конечное состояния электрона должны быть практически на поверхности Ферми: запрет Паули не позволяет «глубоким» электронам получить или отдать такую порцию энергии.

По закону сохранения квазиимпульса, разница между этими положениями должна быть равна импульсу фонона с точностью до вектора обратной решётки, помноженного на постоянную Планка. Но процессы с перебросом в нашей задаче можно не рассматривать, так как минимальный вектор обратной решётки на простой кубической решётке  $G = \frac{2\pi}{a} > 2k_F$ .

Таким образом, задача об угле отклонения сводится к геометрической задаче о нахождении угла в равнобедренном треугольнике, две стороны которого равны фермиевскому импульсу, а одна сторона — дебаевскому. Задача может быть решена по теореме косинусов или другим тригонометрическим способом.

Более геометрическое решение (см. рисунок 1) предлагает построение из точки на поверхности Ферми (соответствующей исходному состоянию электрона) сферы с радиусом, равным дебаевскому импульсу. Пересечения этих сфер дадут геометрическое место точек для конечного состояния электрона при рассеянии на максимальный угол. Максимальный угол отклонения  $\Delta\phi$  можно определить пользуясь известным геометрическим свойством

опирающегося на диаметр внутреннего угла. Откуда:  $\sin \frac{\Delta\phi}{2} = \frac{\omega_D/s}{2\hbar k_F} = \frac{\sqrt[3]{6\pi^2}}{2\sqrt[3]{3\pi^2}} = \frac{1}{2^{2/3}}$  и

$$\Delta\phi \approx 78^\circ.$$

### Задача Т.5.1

*На какой максимальный угол может отклониться электрон при поглощении фотона в одновалентном металле с простой кубической решёткой, хорошо описываемом моделью Дебая и моделью свободных электронов.*

Комментарий: задача подразумевает, что длина волны фотона велика по сравнению с межатомным расстоянием — это соответствует поглощению фотона видимого или ультрафиолетового диапазона.

*Решение:*

Фотон, в отличие от фонона, может иметь сравнимую с электроном энергию (электронвольты). Однако, так как в видимом и УФ диапазонах длина волны фотона много больше атомного масштаба, волновой вектор фотона много меньше фермиевского. Таким образом, при поглощении или испускании фотона квазиимпульс электрона практически не изменяется.

Таким образом, в рамках зонной картины переход электрона между состояниями при поглощении или испускании фотона должен быть «вертикальным»: с заметным изменением энергии, но практически без изменения квазиимпульса. Следовательно, внутри одной зоны процесс излучения или поглощения фотона *вообще невозможен*, так как противоречит закону сохранения импульса и энергии. Испускание фотона большой энергии дополнительно запрещено принципом Паули — все глубокие состояния уже заняты.

Испускание и поглощение фотона маленькой энергии вблизи поверхности Ферми также

невозможно: изменение энергии электрона  $\delta E_e \approx v_F \hbar \delta k$ , а требуемый по сохранению квазиимпульса фотон будет иметь энергию  $E_{ph} = c \hbar \delta k \gg \delta E_e$ .

Межзонный переход (т.н. вертикальный переход) возможен. При этом квазиимпульс практически не изменится, однако направление распространения (направление групповой скорости) может измениться сильно в зависимости от вида ветви спектра, на которую произошёл переход.

### Задача 3.74

В тонких проволочках длины свободного пробега лимитируются диаметром проволочки, поэтому совпадают у электронов и фононов. Оценить, при какой температуре в этих условиях сравниваются электронная и решёточная теплопроводности.

Решение:

Сразу заметим, что хотя проволочки и тонкие, задача является трёхмерной, так как существенно для рассеяния движение в перпендикулярном направлении.

Для электронного вклада в теплопроводность  $\kappa_{el} = \frac{1}{3} v_F C^{(V)} \Lambda = \frac{\pi^2}{3} \frac{n_e \Lambda}{p_F} k_B^2 T$ , где  $\Lambda$  ограничивающий размер (диаметр проволочки).<sup>2</sup>

Для фононов априори не ясно в какой области температур мы окажемся в ответе: будет ли применим закон Дебая, высокотемпературный предел или получится промежуточный случай.

Используем формулу газового приближения:  $\kappa_{ph} = \frac{1}{3} C(T) s \Lambda$ .

Предположим, что применим низкотемпературный дебаевский предел  $C = \frac{12\pi^4}{5} n_{ячеек} k_B \left(\frac{T}{\Theta}\right)^3$ . Для одновалентного металла с примитивной ячейкой, содержащей единственный атом, концентрации электронов проводимости, атомов и ячеек равны. Приравняем две теплопроводности:

$$\frac{\pi^2}{3} \frac{k_B^2 T n_e \Lambda}{\hbar k_F} = \frac{12\pi^4}{5} n_{ячеек} k_B \left(\frac{T}{\Theta}\right)^3 \times \frac{s \Lambda}{3}$$

Откуда: 
$$T^2 = \frac{5 k_B \Theta^3}{12 \pi^2 m v_F s} \approx (70\text{К})^2$$

Численный ответ получен для параметров меди  $s = 3.7 \cdot 10^5 \text{ см/сек}$ , скорость Ферми  $v_F = 1.6 \cdot 10^8 \text{ см/сек}$  температура Дебая  $\Theta = 347\text{К}$  (Внимание: в задачнике в ответах на два порядка ошибочно указана фермиевская скорость).

Полученная температура всего в несколько раз меньше дебаевской, поэтому модель  $T^3$  уже неприменима. При  $T/\Theta = 1/5$  вычисленное по низкотемпературной зависимости значение

2 Можно получить тот же результат, пользуясь законом Видемана-Франца (применимому для рассеяния на границах)  $\frac{\kappa}{\sigma T} = \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k_B}{e}\right)^2$ , а проводимость  $\sigma = \frac{n_e e^2 \tau}{m} = \frac{n_e e^2 \Lambda}{\hbar k_F}$ .

теплоёмкости составляет уже около 60% от максимального значения (см. рисунок 2). Для оценки сравним результат с высокотемпературным пределом, когда фонная теплоёмкость равна  $C = n_{at} 3 k_B$  :

$$\frac{\pi^2 k_B^2 T n_e \Lambda}{3 \hbar k_F} = n_{at} 3 k_B \times s \Lambda / 3$$

$$T = \frac{3 m v_F s}{\pi^2 k_B} \approx 120 \text{K}$$

Полученный ответ опять оказывается вне пределов используемого приближения (теперь температура слишком низка для высокотемпературного предела). Отсюда следует, что, не решая задачу точно, мы можем лишь получить оценку  $T \approx 100 \text{K}$  .

Для завершенности анализа приведём результат графического решения без использования низкотемпературного или высокотемпературного приближения. Если ввести нормированную<sup>3</sup> теплоёмкость на ячейку  $c(T) = \frac{C(T)}{n_{яч} 3k_B}$  , то равенство электронной и решёточной

теплопроводности даёт условие:  $c(T) = \frac{\pi^2 k_B \Theta}{3 s p_F} \frac{T}{\Theta} \approx 2.92 \frac{T}{\Theta}$  , численные значения подставлены, как и выше, для меди.

Как видно из графического решения (рисунок 2), точного решения *нет!* Таким образом, точный анализ показывает, что в рамках используемых приближений в тонких проволочках электронная и фонная теплопроводности не сравниваются никогда, электронная всегда больше. Более того, если бы решение было, то решений должно было бы быть два: низкотемпературное и высокотемпературное (должно было быть две точки пересечения выпуклой дебаевской кривой и линейной кривой теплоемкости ферми-газа).

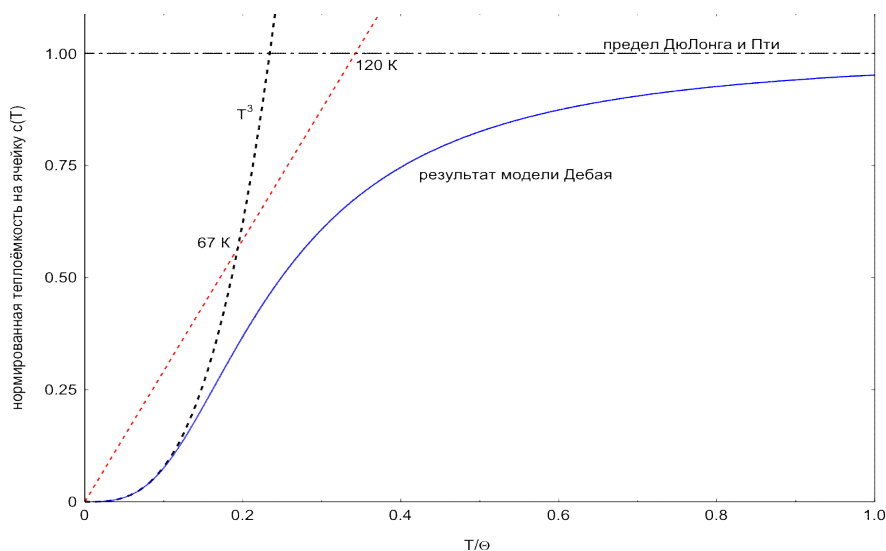


Рисунок 2: Графическое решение задачи 3.74. Синяя кривая - нормированная теплоёмкость дебаевской модели. Чёрный пунктир и итрих-пунктир - низкотемпературное и высокотемпературное приближения. Красный пунктир - вычисленный выше для параметров меди закон  $c = 2.92 \frac{T}{\Theta}$  .

3 Нормировка выбрана так, чтобы давать единичное значение в высокотемпературном пределе.