Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Оренбургский государственный университет»

Н. А. Манаков, Т.И. Пискарёва, В.В. Гуньков

СТРУКТУРНО-ФИЗИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ И ПРОВОДИМОСТЬ МЕТАЛЛОВ

Учебное пособие

Рекомендовано к изданию ученым советом федерального государственного бюджетного образовательного учреждения образования высшего «Оренбургский государственный университет» обучающихся для по образования образовательным программам высшего направлениям ПО подготовки 03.04.02 Физика, 03.06.01 Физика и астрономия

> Оренбург 2021

Рецензент – кандидат технических наук, доцент М.Г. Петрушанский

Манаков, Н.А.

M23 Структурно-физические характеристики и проводимость металлов : учебное пособие / Н.А. Манаков, Т.И. Пискарёва, В.В. Гуньков ; Оренбургский гос. ун-т. – Оренбург : ОГУ, 2021. – 98 с. ISBN

В учебном пособии рассмотрены структурно-физические характеристики металлов, квантовая и классическая теория электропроводности, дается общее представление об их электросопротивлении и электропроводности, производится анализ и оценка параметров Ферми.

Учебное пособие «Структурно-физические характеристики и проводимость металлов» предназначено для обучающихся по программам высшего образования по направлениям подготовки 03.04.02 Физика, 03.06.01 Физика и астрономия.

УДК 537.31 (075.8) ББК 22.33я73

> © Манаков Н.А., Пискарёва Т.И., Гуньков В.В., 2021 © ОГУ, 2021

ISBN

Содержание

Введение
1 Строение металлов и их некоторые структурно-физические характеристики7
1.1 Общее представление об электропроводности и сопротивлении металлов 7
1.2 Общее замечания о структуре кристаллов, кристаллической решетке и
элементарной ячейке11
1.3 Элементы симметрии кристаллов и классификация элементарных ячеек 13
1.4 Особенности и параметры элементарных ячеек металлов
1.5 Индексы направления и индексы узлов
1.6 Фононы. Температура и частота Лебая
Контрольные вопросы
2 Классическое представление об электропроволности металлов
2.1 Понятие об электронах проволимости их концентрации и перемещения в
метаплах 28
2.2. Прейфовая скорость электронов и плотность электрического тока 33
2.2 дренфовая скороств электронов и илотность электронов 35 2 3 Время репаксации проволимости и полвижность электронов 35
2.4 Электропроволность металлов в моделях Лруде и Лорениа 39
2.1 Слектропроводность металлов в моделля друде и эторенца
электронного газа
Контрольные вопросы
З Квантовая теория электропроволности Зонная молель тверлых тел 46
3.1 Молень своболных электронов в металле. Приближение сильной связи и
приближение спабой связи 46
3 2 Общие представления о зонной теории металлов // ////////////////////////////////
3.3 Изображение энергетинеских зон и заполнение их электронами 51
3.5 Изображение энергетических зон и заполнение их электронами
5.4 Функция распределения Ферми-Дирака <i>(Е)</i> . Понятие уровня и энергии
Φ срми
5.5 Среднее значение энергии Ферми. Температура Ферми. Тепловое
возоуждение электронов и анализ их распределения
Контрольные вопросы 02
4. Анализ и оценка параметров Ферми в к-пространстве
4.1 ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ
4.2 Сфера и радиус Ферми. Конкретизация энергии Ферми
4.3 Анализ и оценка Ферми параметров в металле
4.4 Анализ и оценка некоторых параметров Ферми в Р–пространстве
Контрольные вопросы
5. Расчетно – практическая оценка электропроводности и электросопротивления
металлов
5.1 Правило Маттисена76
5.2 Расчетно-практическая оценка электросопротивления р77
5.3 Расчетно-практическая «прямая» оценка электропроводности
5.4 Определение металлов с учетом предварительной независимой оценки
времени релаксации электрона
5.5 Эффективная масса электрона и ее учет при измерении параметров

электропроводности и электросопротивления металлов	87
Контрольные вопросы	92
Список использованных источников	93
Глоссарий	95
r	

Введение

Общеизвестна доминирующая роль курса общей физики в вузах (или факультетах) технического и технологического профилей. Особенно актуально изучение второй части курса, включающей в себя такие важные разделы как базовыми электричество И электромагнетизм, являющиеся для «Электрооборудование специализированных курсов автомобилей», «Электрооборудование технологических транспортных И машин», «Техническое обслуживание электронных систем автомобиля» и «Технические основы электротехники», читаемых, как правило, на вторых – пятых курсах.

Также невозможно представить себе «электрообслуживание» находящихся эксплуатации электромобилей растущего В И числа водородомобилей (автомобилей на водородном сырье). Тем более, если учесть, что «двигатели» последних представляют собой устройства (так называемые топливные элементы), в которых за счет потребления водорода и его последующей электрохимической переработки генерируется электроэнергия в виде электрического тока. Именно модули из нескольких десятков топливных элементов «производят» электрический ток с первичным напряжением ≈ 48 В с последующим преобразованием его конвертором до напряжения порядка 220 В и подводом к тяговому электродвигателю.

Не вдаваясь в детальное обсуждение вопроса об электрооборудовании автотранспортных систем, заметим, что основными элементами общей схемы электрооборудования являются источники электрической энергии (питания), потребители электроэнергии И передающие элементы электроцепи, связывающие первичный источник питания с потребителями. Кроме того, в общую схему электроцепей входят устройства для ИХ включения И приборы выключения, электроизмерительные (амперметры, вольтметры, электропредохранители и т.п.). С физической точки зрения функционирование схемы электропитания, а также ее отдельных участков может быть описано с использованием законов Ома (для замкнутой однородной цепи постоянного

тока, неоднородной цепи и участка цепи). В тоже время, в процессе эксплуатации автотранспорта не исключены отказы тех или иных элементов электрооборудования, проявляющиеся в виде тока короткого замыкания, или наоборот, резкого падения силы тока вплоть до нуля из-за стремительного увеличения нагрузочного сопротивления. С его измерением напрямую связано выделение тепла в энергосистеме, а также падение напряжения в токонесущих проводах, «микросварка» последних, «подгорание и пригорание» контактирующих «узлов» электросистемы, варьирование величины выделяемой полезной мощности и т.д.

Из приведенных примеров следует необходимость углубленного понимания «физико-технической» сущности как омического сопротивления металлов, так и механизмов появления электронов проводимости, их перемещения и рассеяния, имея виду, что фактор рассеивания определяет в конечном итоге реальные значения электропроводности любых «ионнометаллических» кристаллических веществ. В этой связи предпринята попытка написания учебно-методического пособия, в котором при изложении материала по сопротивлению и электрической проводимости металлов основное внимание уделялось выяснению физической стороны излагаемого вопроса.

Целью авторов было построить изложение материала пособия максимально последовательно, сохранив простоту и ясность для того, чтобы облегчить читателю восприятие необходимого минимума знаний, основанных на явлениях, протекающих в металлах.

1 Строение металлов и их некоторые структурно-физические характеристики

Современные об представления электропроводности И сопротивлении металлов опираются на классическую электронную теорию проводимости, основоположником которой является Друде (1900 г); ее дальнейшее развитие связывается с Лоренцем, а также их совместными работами. В последующем Зоммерфельд ввел в эту теорию принципы квантовой статистики. Продолжающийся прогресс теории электропроводности основывался на квантовомеханической зонной теории твердого тела. В конечном итоге, все модельные представления электропроводности И электросопротивления металлов выстроены в целом с учетом особенностей и нарушений их кристаллических решеток, использования акустических фононов, характеристической температуры Дебая и зонной модели твердых тел.

1.1 Общее представление об электропроводности и сопротивлении металлов

Как известно, металлы – лучшие проводники электрического тока, носителями которого являются электроны. Ток в проводнике возникает при наличии разности потенциалов на концах проводника, причем сила тока *i*, текущего по последнему, удовлетворяет закону Ома для участка цепи:

$$i = \frac{\varphi_1 - \varphi_2}{R} \quad , \tag{1}$$

где *R* – величина, характеризующая данный проводник, называется его сопротивлением. Таким образом, сила тока связана линейной зависимостью с

приложенной к нему разностью потенциалов $\varphi_1 - \varphi_2$ и обратно пропорциональна его *R*.

Справедливость закона Ома многократно проверялась в широком диапазоне плотностей тока j=i/S (S – сечение проводника). Отклонения от линейной зависимости не были обнаружены вплоть до плотностей j в 10⁷ *А/см*², что соответствует прохождению 6.10¹⁸ электронов в секунду через каждый *см*² площади поперечного сечения *S* проводника. Эксперименты с еще большим *j* оказались неэффективными из-за сильнейшего нагревания проводника. Способность проводников из различных металлов проводить электрический характеризуется ИХ удельной проводимостью ток (электропроводностью) σ или обратной ей величиной – удельным сопротивлением (электросопротивлением) $\rho = l/\sigma$.

Сопротивление *R* любого металлического проводника зависит от материала (вещества), размеров и формы. В случае проводника постоянного поперечного сечения *S* и длины *L* его сопротивление $R = \rho \frac{L}{s}$. Здесь ρ – величина, зависящая лишь от материала проводника, численно равна *R* проводника, имеющего *S* и *L* равными единице:

$$\rho = R \frac{S}{L} \tag{2}$$

Электросопротивление ρ зависит от температуры проводника, и для большинства металлов при обычных нормальных условиях удельное сопротивление меняется с температурой следующим образом:

$$\rho_t = \rho_0 (1 + \alpha \ t) , \qquad (3)$$

где t – температура по шкале Цельсия, ρ_0 – удельное сопротивление при 0⁰ С (273 ° K), α – температурный коэффициент сопротивления, под которым

понимается отношение относительного изменения сопротивления (или удельного сопротивления) к изменению температуры:

$$\alpha = \frac{\Delta R}{R\Delta T} = \frac{\Delta \rho}{\rho \Delta T} \quad . \tag{4}$$

В литературе можно встретить запись выражения для ρ_T в виде:

$$\rho_{\rm T} = \alpha \rho_0 T \,, \tag{5}$$

где Т – температура по абсолютной шкале, т.е. в К.

Наряду со значением ρ при 0⁰ C (ρ_0) часто приводится величина ρ при 20⁰C (ρ_{20}). Тогда выражение для ρ_{20} записывается в виде:

$$\rho_t = \rho_{20} \left[+ \alpha (t - 20^{\circ} C) \right]_{-.}$$
(6)

Здесь ρ_t – удельное сопротивление при любой температуре *t*, а ρ_{20} – удельное сопротивление при 20⁰C.

Удельное электрическое сопротивление при различных T и температурный коэффициент сопротивления при 20⁰C для ряда металлов приведены в таблице 1. Указанные в ней значения являются средними. Их величина для различных образцов металла зависит от степени чистоты, термообработки и т.д. В случае, если для анализируемого материала неизвестен температурный коэффициент, то необходимо учитывать, что в первом приближении величина α близка к $1/273 \ K^{-1} = 0,00367 \ K^{-1}$.

Таблица 1 – Удельные электрические сопротивления ($m\kappa Om \cdot cm$) и температурный коэффициент некоторых элементов ($20^{\circ}C$)

Элемент	77 K	273 К	293 К	373 К	α,
					10^{-3} K $^{-1}$
Li ⁺	1,04	8,55	9,32	12,4	
Na ⁺	0,8	4,2	4,75	плавится	
K^+	1,38	6,1	7,19	плавится	
Rb^+	2,2	11,0	12,5	плавится	
Cs ⁺	4,5	18,8	20,0	плавится	
Cu ⁺	0,2	1,56	1,72	2,24	3,9
Ag ⁺	0,3	1,51	1,61	2,13	3,6
Au ⁺	0,5	2,04	2,20	2,84	
<i>Be</i> ²⁺		2,8	3,25	5,3	
Mg ²⁺	0,62	3,9	4,40	5,6	
<i>Fe</i> ²⁺	0,66	8,9	9,8	14,7	6,2
Zn^{2+}	1,1	5,5	5,92	7,8	3,5
Al^{3+}	0,3	2,45	2,7	3,55	4,9
In^{3+}	1,8	8,0	8,75	12,1	
Sn ⁴⁺	2,1	10,6	11,5	15,8	4,2
<i>Pb</i> ⁴⁺	4,7	19,0	22,1	27,0	4,1

Если теперь напряженность электрического поля $E = \frac{\phi_1 - \phi_2}{L}$, то закон Ома переписывается в обозначениях, не связанных с размерами проводника:

$$j = \sigma E_{\perp} \tag{5}$$

Это соотношение называется законом Ома в дифференциальной форме. В нем электропроводность выступает в качестве коэффициента пропорциональности, связывающего напряженность электрического поля *E*

в некоторой точке металла с порождаемой этой напряжённостью плотностью тока *j*. Тогда же справедливо соотношение:

$$E = \rho \ \dot{J} , \qquad (6)$$

а также выражение

$$\varphi_1 - \varphi_2 = \rho \frac{iL}{S} \quad , \tag{7}$$

в котором удельное сопротивление *ρ* определяется соответствующим коэффициентом пропорциональности.

1.2 Общее замечания о структуре кристаллов, кристаллической решетке и элементарной ячейке

Кристалл – физическое тело, отличающееся строгой трехмерной периодичностью внутреннего строения или внутренней структуры.

Структурными единицами кристаллов могут быть атомы, ионы или молекулы. При этом четко понимается, что структура кристалла – это жёстко определённое периодическое расположение структурных единиц кристалла в пространстве. При описании структуры кристалла используется понятие кристаллической решетки.

Кристаллическая решётка – удобное геометрическое представление реальной упорядоченной кристаллической структуры. Такой способ представления физической реальности оказался очень удобным в плане изучения кристаллов. Кристаллическая решётка как математическая модель хорошо отражает периодичность пространственного повторения в реальном кристалле как групп структурных единиц, так и отдельных материальных частиц. Особо отметим ещё раз: кристаллическая структура – это физическая реальность; кристаллическая решетка – удобное геометрическое представление кристаллической структуры.

В реальном ионном или атомном «металлическом» кристалле (монокристалле) структурные частицы металла в качестве ионов или атомов строго расположены в определенном порядке на расстояниях между собой в несколько ангстрем (1 $A^0 = 10^{-8} c_M$). Число структурных частиц в 1 c_M^3 монокристалла составляет ~ 10²³. Поэтому для изучения характера расположения структурных частиц и других физических свойств кристаллов принято выделять и исследовать группу частиц, находящуюся в таком минимальном объеме кристалла, который полностью отражает и описывает все его структурные свойства. Подобный минимальный объем носит ячейки Последняя название элементарной кристалла. содержит незначительное «полное» число атомов (ионов) того или иного кристалла и характеризуется малыми линейными размерами в интервале $10^{-8} - 10^{-7} \, cm$. Отсюда следует, что макрокристалл можно представить себе сложенным из огромного числа элементарных ячеек.

С кристаллографической точки зрения кристаллическая решетка представляет собой трехмерную пространственную решетку, в узлах которой должны располагаться структурные частицы: атомы, ионы или молекулы, образующие кристалл (рисунок 1).



Рисунок 1 – Кристаллическая решетка

Подобная пространственная решетка определяется элементарным параллелепипедом, построенным на трех векторах, так называемых трансляциях $(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$, который в дальнейшем, будем называть примитивной элементарной ячейкой с характерным для данной решетки расположением структурных частиц, внутри которой нет узлов. Во всех случаях форма основной (элементарной) ячейки решетки определяется отношением ее ребер (трех основных трансляций) a:b:с и величинами углов между осями (α, β , γ). Величины ребер – кратчайшие из возможных расстояний между одинаковыми узлами элементарной ячейки (параллелепипеда), носят название постоянных решетки; иногда употребляют название периода трансляций. Таким образом, можно говорить 0 параллелепипеде, трех элементарных векторах, ориентированных построенном на соответственно по осям X, У, Z. Совокупность подобных элементарных параллелепипедов для данной кристаллической решетки можно рассматривать как систему параллельных элементарных ячеек, касающихся между собой целыми гранями и заполняющих пространство решетки. Другими словами, с помощью последовательных перемещений элементарного параллелепипеда (примитивной элементарной ячейки) вдоль трех осей X, Y, Z в пространстве получаем в итоге пространственную решетку (трансляционный каркас), т.е. трехмерную систему закономерно повторяющихся эквивалентных узлов. Каждый узел в трансляционном каркасе символизирует геометрический образ и положение иона, атома, атомной группы или молекулы, периодически повторяющиеся в бесконечном пространстве (рисунок 1).

1.3 Элементы симметрии кристаллов и классификация элементарных ячеек

Симметрия форм кристаллов определяет в первую очередь симметрию их физических свойств. Кристалл – это реальное физическое тело, имеющее решетчатое строение. В свою очередь, решетка – абстрактный математический

IJ

образ, с помощью которого фиксируется расположение в пространстве ее узлов, которыми являются ионы, атомы или молекулы.

Для кристаллов характерно повторение одинаковых граней, ребер вершин, что свидетельствует об упорядоченности их внутренней структуры. Симметрию внешнего облика кристалла отражает симметричный многогранник, который способен совместиться сам с собой в результате симметричных преобразований. В характерный набор элементов симметрии входят центр симметрии (инверсии), плоскость симметрии, обычные оси симметрии и инверсионные оси.

Центр симметрии или центр инверсии (C) – точка внутри многогранника (фигуры), которая характеризуется тем, что любая прямая, проведенная через центр симметрии, встречает одинаковые (подобные) точки фигуры по обе стороны от *C* на равных расстояниях. В кубе, например, есть центр *C*, совпадающий с геометрическим центром куба. Следовательно, любая прямая, проведенная через центр куба, встретит подобные части куба на одинаковых расстояниях от центра.

Ось симметрии L – это прямая, обладающая тем свойством, что кристалл при обороте вокруг нее на 360° совмещается сам с собой *n* раз. Число *n* называется порядком оси. Разделив 360° на *n*, получаем угол наименьшего поворота, при котором кристалл совмещается сам с собой. Элементарный угол поворота оси на 360° отвечает оси симметрии первого порядка L_l . Соответственно углы поворота на 180°, 120°, 90° и 60° отвечают осям симметрии L_2 , L_3 , L_4 , L_6 . Ось пятого порядка L_5 в кристаллах не существует (за исключением квазикристаллов), как и оси симметрии выше шестого порядка.

Плоскость симметрии *P* – плоскость, которая делит кристалл на две равные части, расположенные относительно друг друга как предмет и его зеркальное изображение.

Инверсионная ось – самый сложный элемент симметрии. Она представляет собой сочетание оси вращения и одновременного отражения

(инверсии) в центре симметрии C. Инверсионные оси обозначаются L_{1i} , L_{2i} , L_{3i} , L_{4i} , L_{6i} ,

В заключение обратим внимание на то, что все кристаллы симметричны. Это значит, что в каждом кристаллическом многограннике можно отобразить плоскость симметрии, ось симметрии, центры симметрии и другие элементы симметрии. Математическим путем доказано, что в кристалле существует 32 вида симметрии.

Элементы симметрии могут проявляться в кристаллах отдельно или в разных комбинациях. В частности, при анализе нами «металлических» кристаллов не будут использоваться инверсионные оси.

1.4 Особенности и параметры элементарных ячеек металлов

Каждый кристалл характеризуется своей кристаллической решеткой, выполненной элементарными ячейками с величинами своих основных трансляций и значениями углов между ними.

В зависимости от внешней формы и своего внутреннего строения (внутренней структуры) кристаллы делятся на кристаллографические системы или сингонии (сингония – сходноугольность). По форме элементарной ячейки, определяемой отношением их ребер a:b:c и величинами углов α , β , γ , лежащих против осей X, V, Z, образующих правую систему координат, выделяют семь сингоний (таблица 2). Формы примитивных элементарных ячеек, соответствующих семи кристаллическим сингониям, приведены на рисунке 2.

Металлы кристаллизуются почти исключительно в кубической и гексагональной сингониях, и поэтому их кристаллические структуры сравнительно просты. У большинства металлов, имеющих практическое значение, элементарные ячейки состоят из небольшого числа *z* атомов. Кратко рассмотрим основные типы.



Рисунок 2 – Формы элементарных ячеек

Сингония	Оси	Характерная	Форма	Объем
	координат	симметрия	элементарной	элементарной
			ячейки	ячейки V _{эя}
1	2	3	4	5
Триклинная	$a \neq b \neq c$	Ось L_1 или $\bar{1}$	Косоугольный	$abc(1 - \cos^2 \alpha -$
	$\alpha \neq \beta \neq \gamma = =90$ °		параллелепипед	$\cos^2\beta - \cos^2\gamma$
				$+ 2 \cos \alpha \cdot \cos \alpha$
				$\beta \cdot \cos \gamma)^{\frac{1}{2}}$
Моноклинная	$a \neq b \neq c$	Ось L ₂ или	Прямая призма (в	aвc∙sinβ
	$\alpha = \gamma = 90^{\circ} \neq \beta$	плоскость Р	ее основании	
			параллелограмм)	
Ромбическая	$a \neq b \neq c$	Три оси L ₂ или	Прямоугольный	авс
	$\alpha = \beta = \gamma = =90^{\circ}$	три плоскости Р	параллелепипед	
Тригональная	$a = b \neq c$	Ось L ₃ или <u>3</u>	Призма (в ее	$a(1-3\cos^2\alpha)$
	$\alpha = \beta = \gamma = =120^{\circ}$		основании – ромб	$+2\cos^2 \alpha)^{1/2}$
			с углом 120 $^{\circ}$)	1 2005 W/ -
Гексагональн		Ось L ₆ или $\overline{6}$		0,86 a ² c
ая				
Тетрагональн	$a = b \neq c$	Ось L ₄ или $\overline{4}$	Призма с	<i>a</i> ² <i>c</i>

ая	$\alpha = \beta = \gamma = = 90^{\circ}$		квадратным	
			основанием	
Кубическая	a = e = c	Четыре оси 3 L ₃	Куб	a ³
	$\alpha = \beta = \gamma = = 90^{\circ}$			

В кристаллах кубической сингонии возможны три типа кристаллических решеток: простая кубическая (ПК) (рисунок 3а) с примитивной ячейкой, объемно-центрированная кубическая (ОЦК) (рисунок 3б) и гранецентрированная кубическая (ГЦК) (рисунок 3в).



Рисунок 3 – Типы кристаллических решеток

Простая кубическая ячейка представляет собой куб, в вершинах которого расположено по одному атому, т.е. расположены в узлах ячейки, при полном отсутствии атома внутри элементарной ячейки. Каждый атом имеет 6 ближайших структурных соседей-атомов, находящихся на одинаковом расстоянии от любого атома в ПК ячейки (так называемые координационное число к.ч. = 6). Объем элементарной ячейки $V_{\Pi K} = a^3$, где a – постоянная решетки, равная расстоянию между двумя атомами в ПК элементарной ячейке.

Объемно-центрированная кубическая ячейка (ОЦК) представляет собой простую кубическую, в центре которой расположен атом, лежащий на пересечении пространственных диагоналей куба. На элементарную ОЦК решетку приходится 2 атома z = 2. Каждый атом окружен 8 ближайшими

атомами, т.е. к.ч. = 8. Следует отметить, что ОЦК решетку можно рассматривать как систему из двух одинаковых ПК решеток, причем в одной из них атомы находятся в вершинах кубов, а другая содержит центральный атом.

Гранецентрированная кубическая (ГЦК) элементарная ячейка характеризуется тем, что атомы занимают все вершины куба и центр каждой грани. Отсюда и происходит название – гранецентрированная кубическая решетка. Каждый атом в ГЦК имеет 12 ближайших соседей (к.ч. = 12), а количество атомов в ней на одну ячейку z = 4. Следует отметить, что ГЦК решетка как бы состоит из четырех идентичных простых кубических ячеек, расположенных определенным образом относительно друг друга.

Элементарная ячейка гексагональной сингонии или гексагональная плотноупакованная (ГПУ) представляет собой прямую призму, в основании которой лежит ромб с углами 60° и 120°. Решетка примитивная: два угла между осями ячейки прямые, а один равен 120°. Высота элементарной призмы не равна длине стороны ромба, лежащего В основании. Три таких элементарных ячейки составляют гексагональную призму. Сопоставление примитивной ячейки гексагональной системы и гексагональной призмы приведено на рисунке 4.



Рисунок 4 – Гексагональная призма

Характеристики кристаллической структуры ряда металлов при 293 К приведены в таблице 3, включающие в себя: постоянные решетки а и кратчайшие расстояние между атомами d.

Символ	Элемент	Структура	Постоянные	Расстояние между
			решетки	ближайшими
			a, Å	соседями $d, \overset{0}{A}$
Al	Алюминий	ГЦК	4,04	2,86
Be	Бериллий	ГПУ	2,27	2,22
V	Ванадий	ОЦК	3,03	2,63
W	Вольфрам	ОЦК	3,16	2,73
Fe	Железо	ОЦК	2,86	2,48
Au	Золото	ГЦК	4,07	2,88
K	Калий	ОЦК	5,33	4,62
Со	Кобальт	ГПУ	2,51	2,50
Li	Литий	ОЦК	3,50	3,03
Mg	Магний	ГПУ	3,20	3,19
Си	Медь	ГЦК	3,61	2,55
Мо	Молибден	ОЦК	3,14	2,72
Na	Натрий	ОЦК	4,28	3,71
Ni	Никель	ГЦК	3,52	2,85
Pt	Платина	ГЦК	3,92	2,77
Rb	Рубидий	ОЦК	5,62	4,87
Pb	Свинец	ГЦК	4,94	3,49
Ag	Серебро	ГЦК	4,08	2,88
Ti	Титан	ГПУ	2,95	2,91
Cr	Хром	ОЦК	2,88	2,49
Zn	Цинк	ГПУ	2,66	2,66
Cs	Цезий	ОЦК	6,05	5,24

Таблица 3 – Характеристики кристаллической структуры некоторых металлов

1.5 Индексы направления и индексы узлов

Важнейшим геометрическим свойством кристаллов, кристаллических решеток и их элементарных ячеек является симметрия по отношению к определенным направлениям (осям). Дело в том, что в кристаллах многие физические свойства (электросопротивление, электропроводность, теплопроводность, механические модули, показатель преломления и др.) могут быть различными для разных направлений. В случае, если физические свойства В направлениях В кристалле симметрично эквивалентных независимы от последних, т.е. одинаковы по всем направлениям, то говорят об изотропности кристалла. Если же для разных направлений внутри кристалла эти свойства будут различными, то говорят, что такой кристалл обладает анизотропностью или анизотропией, а кристалл сам называется анизотропным.

Таким образом, под анизотропией четко понимается конкретная зависимость ряда физических свойств микроскопически однородного твердого тела от направления по отношению к осям координат, связанным с самим телом. Отсюда следует важность «выделения» направления (направлений) в кристаллических телах, поскольку не все направления равновероятны.

Для описания направления в кристалле всегда выбирают прямую, проходящую через начало координат, связывая при этом систему координат с элементарной ячейкой. В качестве осей системы координат принимают ребра ячейки, условно считая их длину единичной.

Положение «прямой направления» в кристалле принято описывать с помощью направлений [*mnp*], где *m*, *n*, *p* – целые числа, являющиеся координатами узла элементарной ячейки, которые задаются следующим образом (рисунок 5): x = ma, y = nb, z = pc (*a*,*b*,*c* – постоянные решетки или осевые единицы длины). Индексы узла записывают в виде *mnp* в предположении, что символом атома (узла) называется три характеризующие его координаты *x*, *y*, *z*. В записях индекса направления и

индекса узла числа m, n, p – любые целые положительные или отрицательные числа (над – индексом ставится знак минус), а также нуль (например, начало координат 000). Из сравнения индексов направления и узлов следует, что положение прямой направления, проходящей через начало координат, однозначно определяется индексами m, n, p первого узла, через который она проходит (см. рисунок 5). Поэтому индексы узла m, n, p служат одновременно и индексами направления. Последние, по самому определению, представляют собой три наименьших целых числа, характеризующих положение ближайшего узла, который расположен на данном направлении.



Рисунок 5 – Координаты узла элементарной ячейки

В качестве примера на рисунке 6 изображены индексы основных направлений в кубической решетке.

Индексы положительных и отрицательных направлений осей решетки: направление вдоль оси $OX - [1 \ 0 \ 0]$ и $[\overline{1} \ 0 \ 0]$, оси $OY - [0 \ 1 \ 0]$ и $[0 \ \overline{1} \ 0]$, вдоль оси $OZ - [0 \ 0 \ 1]$ и $[0 \ 0 \ \overline{1}]$].

Индексы диагоналей граней: диагональ грани *XOY* – [1 1 0], диагональ грани *XOZ* – [1 0 1], диагональ грани *YOZ* – [0 1 1]. Индексы пространственной диагонали [1 1 1].



Рисунок 6 – Индексы основных направлений в кубической решетке

Семейство эквивалентных направлений обозначается ломаными скобками (*mnp*). В частности, восемь диагоналей куба $\begin{bmatrix} 111 \\ 111 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 1\overline{1}1 \\ 1\overline{1}1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 1\overline{1}1 \\ 1\overline{1}1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 11\overline{1} \\ 1\overline{1}1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 1\overline{1}\overline{1} \\ 1\overline{1}1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 1\overline{1}\overline{1}1 \\ 1\overline{1}1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 1\overline$

обозначаются как группа (111); все они получаются с подстановкой индексов ± 1 .

1.6 Фононы. Температура и частота Дебая

В классической механике движения микрочастицы массой *m* и скоростью *u* характеризуются энергией $p^2/2m$ и импульсом *p=mu*. В свою очередь, все ионы кристаллической решетки, между которыми действуют электростатические силы, представляют собой совокупность связанных «маятников» или осцилляторов. Если рассматривать ионы решетки в качестве изолированных осцилляторов, то все бы они совершали колебания одинаковой частоты ω . Но т.к. все ионы связаны между собой, то это приводит к тому, что они могут колебаться с различными частотами в интервале от 0 до ω_{max} , причем в колебании с каждой частотой ω принимают участие все ионы.

В трехмерном кристалле имеют место два типа упругих волн: продольные (L) и поперечные (T). В продольной волне (L) направление распространения волны совпадает с направлением колебаний атомов (атомы колеблются вдоль направления распространения). В поперечных (T) волнах (их две) – атомы колеблются в плоскости, перпендикулярной направлению распространений, причем колебания поперечных волн происходят во взаимно перпендикулярных направлениях и их частоты ω^k в практических расчетах принимаются одинаковыми.

Таким образом, смещение атомов описывается колебаниями решетки, каждое из которых представляет собой волну. В любом объемном кристалле, содержащем s атомов в V_{39} реализуются 3s L и T волн, называемых акустическими (AB) и (3s – 3) – оптических волн (OB), продольных и поперечных.

С позиции классической механики направления распространения упругой волны определяется волновым вектором k, значения которого меняется в пределах $-\frac{\pi}{a} \leq \overline{k} < \frac{\pi}{a}$, где a – постоянная решетки.

Сама же волна характеризуется длиной волны λ и частотой ω , связанных между собой соотношением:

$$\omega = 2\pi \frac{u_{36}}{\lambda} = u_{36} \mathbf{k} , \qquad (8)$$

из которого следует, что каждому значению *k* соответствует волна, обладающая определенной частотой колебания.

В рамках квантовой механики для микрочастиц справедливо явление дуализма, отражающего тот факт, что каждой движущейся частице с импульсом $\overrightarrow{p} = \hbar \cdot \overrightarrow{k}$ (соотношения де Бройля, где \hbar – постоянная Планка) можно поставить в соответствие некоторую волну, имеющую частоту ω и волновой вектор \vec{k} , и наоборот. Т.е. каждую волну колебаний можно рассматривать как некоторую квазичастицу, которая носит название фонона или кванта энергии $\hbar\omega$ (квант энергии колебаний решетки).

Следовательно, каждое колебание кристаллической решетки в энергетическом отношении эквивалентно фонону. Концентрация фононов в кристалле не постоянна, и она возрастает с ростом температуры:

$$\bar{n_{\phi}} \approx \frac{k_0 \mathrm{T}}{\hbar \omega} , \qquad (9)$$

где *k*₀ – постоянная Больцмана.

При низких температурах, когда $k_0T < \hbar\omega$, среднее число фононов

$$n_{\phi} \approx exp(-\hbar\omega/\kappa_0 T).$$
 (10)

Так же как и акустические *L* и *T* волны, фононы носят название продольных и поперечных акустических фононов (*LAФ*, *TAΦ*). Энергия акустических фононов $E_{A\Phi} = \hbar \omega_{A\Phi} = \hbar u^{36} k$, где u_{36} – скорость звука, равная скорости распространения продольных $A\Phi$:

$$\omega_{LA\Phi} = u_{\mathfrak{B}} k \operatorname{H} u_{\mathfrak{B}} = \frac{\omega_{LA\Phi}}{k}.$$
(11)

Следует отметить, что частоты колебаний ионов не могут превышать

$$\omega_{\max} \approx \frac{\pi u_{3B}}{a},$$
 (12)

а это означает, что энергия отдельного фонона имеет предельную величину:

$$E_{\max} \approx \frac{\pi \hbar u_{3B}}{a}.$$
 (13)

Выше отмечено, что элементарные возбуждения кристаллической решетки, связанные с колебаниями ионов, являются фононами, которые рассматриваются как квазичастицы с импульсом $\hbar k$ и энергией $h\omega$.

Максимальная частота ω_m , с которой могут колебаться атомы (ионы) около своих положений равновесия в кристаллической решетке, носит название характеристической или дебаевской частоты ω_D . Последняя в соотношении:

$$\hbar\omega_D = k_0 \,\,\theta \tag{14}$$

определяет температуру Дебая:

$$\boldsymbol{\varTheta} = \frac{\hbar \omega_D}{k_0} , \qquad (15)$$

с помощью которой детализируется ряд расчетно-физических выражений. В частности, при описании некоторых тепловых свойств кристаллов предполагается, что при температуре Дебая тепловая энергия $k_0 \Theta$ как раз равна максимальной энергии кванта колебаний $\hbar \omega_{max} = \hbar \omega_D$

В целом дебаевская температура *Θ* определяется как физический параметр любого твердого тела, имеющая конкретное численное значение (в К) для любого кристаллического твердого материала.

С другой стороны, температура Дебая и дебаевская частота удовлетворительно описывают ряд физических параметров кристалла, связанных с колебаниями структурных частиц кристаллических решеток. В этой связи дебаевскую температуру используют в качестве критерия температуры тела Т. Если $T > \Theta$ – это высокие температуры для данного кристалла, при $T < \Theta$ – низкие.

Подобное «температурное» разделение твердых тел имеет исключительно важное значение. В качестве примера достаточно привести «проводящие» металлы, у которых электропроводность:

$$\sigma \sim T^{-1}$$
, $(T > \Theta)$; $\sigma \sim T^{-5}$, $(T < \Theta)$.

Температура Θ экспериментально определятся с помощью разнообразных независимых методов. Наиболее достоверные данные по Θ (по низкотемпературному пределу) и скорости звука u_{3B} , рассчитанные по экспериментальным данным, приведены в таблице 4.

Таблица 4 –	Дебаевские	температуры	и скорости	звука	некоторых
металлов					

Элемент	θ, Κ	$u_{3B} \times 10^5 \frac{CM}{C}$	Элемент	θ,Κ	$u_{3B} \times 10^5 \frac{CM}{c}$
Li	400	5.8	Mg	400	
Na	158	3.08	Fe	470	6.06
K	100	2.575	Zn	327	4.2
Rb	56		Al	428	6.79
Cs	54		In	108	2.74
Си	343	4.83	Sn	260	3.21
Ag	225	3.79	Pb	105	2.158

Контрольные вопросы

- 1. Закон Ома для участка цепи.
- 2. От чего зависит сопротивление металлического проводника.
- 3. Температурная зависимость удельного сопротивления металлов.
- 4. Элементарная ячейка кристалла.
- 5. Оси симметрии кристаллов.
- 6. Кристаллографические системы кристаллов.
- 7. ОЦК, ГЦК и ГПУ элементарные ячейки.
- 8. Соотношение де Бройля.
- 9. Импульс и энергия фонона.
- 10. Температура Дебая.

2 Классическое представление об электропроводности металлов

2.1 Понятие об электронах проводимости, их концентрации и перемещения в металлах

В металлах, как известно, реализуется металлическая связь. Она основана на коллективизации (обобществлении) валентных электронов всех структурных атомов кристаллической решетки данного металла. Эти электроны теперь не связаны с определенными атомами, ставшими металлическими ионами, и способны передвигаться по всему объему металла. В литературе подобные электроны получили название электронов проводимости или свободных электронов, образуя в объеме металла своеобразный «электронный газ». Он обладает своего рода «цементирующим» действием, связывая в прочную систему положительно заряженные ионы металла, располагающиеся на некотором равновесном расстоянии друг от друга.

Концентрация свободных валентных электронов (т.е. электронов проводимости) n_c в 1*см*³ огромна и для разных металлов n_c различно. Их оценка осуществляется достаточно просто.

Любое металлическое вещество содержит $0,6022 \cdot 10^{24}$ атомов на один моль (известное число Авогадро) и $\frac{\rho_m}{A}$ молей на lcm^3 , где ρ_m – массовая плотность ($\frac{2}{cm^3}$), а A – относительная атомная масса. Так как валентность каждого атома Z определяется числом отданных электронов (M – Z) \rightarrow (M^Z + Z), то общее число электронов на lcm^3 составляет

$$n = 0.6022 \cdot 10^{24} \, \frac{Z\rho_m}{A} \, . \tag{16}$$

В сущности n -это концентрация электронов проводимости n_c , которая часто носит название плотности электронного газа, равной отношению числа электронов N в объеме V: n = N/v (см. таблицу 5). При некоторых практических расчетах используем величину r_s – радиус сферы, объем которой равен объему, приходящемуся на один электрон проводимости или содержащей один электрон. Значение r_s находится из равенства:

$$\frac{V}{N} = \frac{1}{n_c} = \frac{4\pi r_s^3}{3}$$
(17)

$$r_{S} = \sqrt[3]{\frac{3}{4\pi n_{C}}}$$
(18)

и часто используется в виде отношения r_s/a_0 , где $a_0 = 0,53 * 10^{-8}$ см – боровский радиус.

Таблица 5 – Электронные плотности некоторых металлических элементов в соответствии с моделью свободных электронов

Элемент	Ζ	n,	r_{s} , $\overset{\circ}{A}$	r_s / a_0	Элемент	Ζ	<i>n</i> ,	r_s , $\overset{\circ}{A}$	r_s / a_0
		$10^{22} cm^3$					$10^{22} cm^3$		
Li	1	4.70	1.72	3.25	Mg	2	8.6	1.4	2.66
Na	1	2.65	2.08	3.93	Fe	2	17.0	1.12	2.12
K	1	1.4	2.57	4.86	Zn	2	13.2	1.22	2.3
Pb	1	1.15	2.75	5.20	Al	3	18.1	1.10	2.07
Cs	1	0.91	2.98	5.62	In	3	11.5	1.27	2.41
Си	1	8.47	1.41	2.67	Sn	4	14.8	1.17	2.22
Ag	1	5.86	1.60	3.02	Pb	4	13.2	1.22	2.3
Аи	1	4.9	1.59	3.01	Bi	5	14.1	1.19	2.25
Be	2	24.2	1.0	1.87	Sb	5	16.5	1.13	2.14

Плотность свободных электронов (или электронов проводимости) *n* может быть порядка $2 \cdot 10^{22} cm^3$ и выше в зависимости от места атомов металла в периодической системе элементов. Статистическое распределение электронов проводимости по скоростям совпадает с распределением в обычном классическом газе *n* и описывается в состоянии термодинамического развития при температуре T формулой Максвелла-Больцмана. При таком предположении число электронов *n* в единице объема, скорости которых лежат в интервале *du* = *du* ч *du* ^y *du* ^g с центром в точке *u* × *u* ^y *u* = (= *u*), равно

$$f_B(du) = n \Im \left(\frac{m}{2\pi k_0 T}\right)^{3/2} exp\left(\frac{-mu^2}{2k_0 T}\right) du, \qquad (19)$$

где $f_{\rm B}$ - равновесная функция распределения.

Равновесное распределение Больцмана в пространстве скоростей показано на рисунке 7.



Рисунок 7 – Распределение Больцмана по скоростям

При этом предполагается, что скалярная скорость, соответствующая средней энергии, есть хорошо известная средняя квадратичная скорость

$$\sqrt{\bar{u^2}} = \sqrt{\frac{3k_0T}{m}} \, u_{\pi u} \, \bar{u} = \sqrt{\frac{3k_0T}{m}} \,, \tag{20}$$

а средняя кинетическая энергия, приходящаяся на электрон, составляет

$$\overline{E}_{K} = \frac{3}{2}k_{0}T = \frac{1}{2}m\overline{u}^{2},$$
(21)

Выражение (19) справедливо при полном отсутствии внешнего электрического поля *E*, что позволяет говорить о равноверотности всех направлений скоростей электронов. Последние в подобной ситуации постоянно изменяются из-за упругих столкновений с положительно заряженными ионами металла.

Совершенно естественным является предположение о том, что средняя длина свободного пробега электрона l определятся его упругими столкновениями с ионами металла, каждый из которых в зависимости от своей валентности обладает эффективным радиусом рассеяния, равным «ионному» радиусу r_u соответствующего иона (величины r для ионов различной валентности даны в таблице 5). В металле, содержащем в единице объема n_u ионов с определенным r_u , длина свободного пробега (длина пробега между двумя рассеивающими соударениями) записывается в виде:

$$\ell_m \approx \frac{1}{n_u \pi r_u^2} \tag{22}$$

В предположении независимости концентрации электронов в металле от его температуры T из (20) следует, что средняя квадратическая скорость u в больцмановском приближении представляет собой тепловую скорость u_T , которая, в свою очередь, зависит от температуры, но не зависит от концентрации электронов. При этом u_T является той тепловой скоростью, с 31 которой электрон движется от одного рассеивающего структурного положительно заряженного иона (рассеивающий центр) к другому с реализацией в этой связи хорошо известного выражения:

$$u_T(\bar{u}) = (3k_0T/m)^{\frac{1}{2}}$$
 (23)

В рассматриваемом приближении должна полностью выполняться связь между l_m и u_T в виде:

$$\tau_m = \frac{\ell_m}{u_{\rm T}},$$

где τ_m есть не что иное, как среднее время пробега электрона со скоростью u_T между его двумя последовательными соударениями с рассеивающими центрами (ионами решетки). Вполне понятно, что любое внешнее поле будет оказывать влияние на изменения скорости электрона в течение нескольких интервалов времени, сопоставимых с τ_m .

Рассчитанные значения l_m , τ_m при 273 К и $u_T = 1,1\cdot 10^7$ см/с для ряда металлов приведены в таблице 6.

Металл	Число	Эффективный	Срелняя ллина	Срелнее время
	свободных электронов в см ³ , n, 10 ²²	радиус рассеяния r_u , $\stackrel{\circ}{A}$	свободного пробега ℓ_m, \mathring{A}	свободного пробега $\tau_m; 10^{-15} c$
1	2	3	4	5
Li ⁺	4,7	0,68	1,465	1,33
Na ⁺	2,652	0,98	1,25	1,14
K^+	1,402	1,33	1,28	1,164
Pb^+	1,148	1,49	1,25	1,14

Таблица 6 — Рассчитанные l_m , τ_m некоторых металлов.

Cs ⁺	0,905	1,65	1,29	1,17
Cu ⁺	8,45	0,98	3,95	3,58
Ag +	5,85	1,13	0,426	0,39
Au ⁺	5,90	1,37	0,29	0,26
Be ²⁺	12,1	0,34	2,3	2,1
Mg ²⁺	4,30	0,74	1,35	1,23
<i>Fe</i> ²⁺	8,50	0,8	0,59	0,54
Zn^{2+}	6,55	0,83	0,7	0,64
Al^{3+}	4,02	0,57	1,63	1,48
In^{3+}	3,83	0,92	0,98	0,9
Sn ⁴⁺	3,62	0,67	1,216	1,1
<i>Pb</i> ⁴⁺	3,30	0,76	1,66	1,5

2.2 Дрейфовая скорость электронов и плотность электрического тока

В отсутствии внешних электрических полей вследствие хаотичности теплового движения электронов в среднем нет их направленного движения, т.е. среднее смещение и средний вектор скорости за достаточно заметный промежуток времени равны нулю. Равна, тем самым, нулю и соответствующая Eсуммарная плотность тока. В присутствии поля на хаотично перемещающиеся свободные электроны со стороны поля начнут действовать силы F = eE, в результате чего начнется упорядоченное движение электронов с некоторой средней общей скоростью и, часто называемой скоростью упорядоченного движения ИЛИ скоростью дрейфа С подобным \mathcal{U}_d . направленным движением или дрейфом связан направленный перенос электрического заряда, т.е. электрический ток.

Таким образом, электрон проводимости в поле E приобретает в дополнение к своей тепловой скорости дрейфовую скорость u_d , величина которой в случае «постоянного тока», не меняющегося со временем, определяется выражением:

$$u_d = -\frac{e}{m} E \tau \tag{24}$$

здесь τ носит название времени релаксации проводимости τ_r (в дальнейшем просто τ).

Считается, что в единичном объеме соответствующего металла находится n электронов проводимости, имеющих в электрическом поле E одну и ту же постоянную дрейфовую скорость u_d . Поэтому плотность электрического тока j, определяемая, как известно, количеством электронов, протекающих с дрейфовой скоростью через единичную площадку в единицу времени, равна:

$$j = neu_d \tag{25}$$

а с учетом u_d по формуле (24)

$$j = \frac{ne^2\tau}{m}E.$$
 (26)

Если сопоставить это выражение для j с законом Ома в дифференциальной форме ($j = \sigma E$), то положительная скалярная величина σ есть значение удельной электрической проводимости металла

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m}.$$
(27)

Электропроводность σ имеет место и в зонной модели металлов, и в квантовой модели, причем различие в моделях определяют входящие в выражение для σ (27) величины *m*, *n*, τ .

Так как электросопротивление ρ определяется как величина, обратная электропроводности σ , то

$$\rho = \frac{1}{\sigma} = \frac{m}{ne^2\tau} \tag{28}$$

и, следовательно,

$$\tau(\tau_{\rho}) = \frac{m}{\rho n e^2} \,. \tag{29}$$

Наряду с т из (27)

$$\tau(\tau_{\sigma}) = \frac{\sigma m}{ne^2} \,. \tag{30}$$

2.3 Время релаксации проводимости и подвижность электронов

Релаксация происходит вследствие взаимодействия электронов со своей кристаллической решеткой, в то время как время релаксации связано с протекающим при этом рассеянием электронов. Поэтому для характеристики процессов рассеяния были введены две физически важные величины: время свободного пробега τ_s и длина свободного пробега l_c . Первая величина связана со средним временем движения электрона между двумя его соударениями, вторая – как средний путь, проходимый электроном между этими двумя соударениями.

С физической точки зрения τ представляет собой то время, в течение которого поле действует на свободно движущийся электрон. Действие поля на электрон заканчивается столкновением его с рассеивающим центром. Поэтому можно считать, что время τ (или время релаксации τ_r) есть некоторое

характеристическое определяющее время, установление равновесия движущихся электронов путем их столкновений. Действительно, после столкновения электрона с рассеивающим центром все начинается снова. В рассматриваемом контексте для названия т часто употребляется термин «время свободного пробега». При «постоянная времени» И ЭТОМ подразумевается, что «постоянная времени» характеризует время установления стационарного режима движения, движения носителя заряда со средней скоростью дрейфа $e \tau E/m$ в поле E.

Другими словами, величина τ действительно имеет конкретный смысл времени релаксации τ_r в том смысле, что она соответствует среднему времени установления стационарного состояния движущихся электронов, а тем самым, стационарного значения плотности *j* при включении поля *E*. Таким образом, величина τ_r есть время релаксации проводимости, поскольку она определяет процесс релаксации только в случае включения внешнего электрического поля.

С точки зрения молекулярно-кинетической теории движение частиц происходит с внутренним трением, под действием ускоряющей силы и обязательных столкновений, во время которых частица теряет энергию. При подобном подходе τ_c – среднее время между двумя столкновениями, а произведение τ_c на среднюю скорость \overline{u} представляет собой длину свободного пробега l_c , т.е. среднее расстояние, которое проходит частица между столкновениями:

$$\ell_c = \overline{u}\tau_c \tag{31}$$

Время релаксации тесно связано с рассеиванием электронов из-за их соударения с кристаллической решеткой. С другой стороны, величины дрейфовой скорости в металле тем больше, чем больше время релаксации, что однозначно следует из выражения (24). Поэтому время релаксации является важной специфической характеристикой не только металла, но и любого
проводящего электрический ток вещества. В этой связи была введена физическая величина, связывающая τ_r и дрейфовую скорость u_d , и получившая название дрейфовой подвижности электронов μ_d .

Подвижность *µ* определяется как средняя (дрейфовая) скорость, отнесенная к единице напряженности электрического поля *E*, т.е. с учетом (24)

$$\mu_d = \frac{u_d}{E} = \frac{e\,\tau}{m} \ . \tag{32}$$

Таким образом, подвижность – это, в сущности, средняя скорость, достигаемая носителем заряда за время релаксации *τ* в поле единичной напряженности. Подвижность характеризует силу сопротивления среды (кристаллического вещества), через которую движутся электроны. В самом деле, если не было бы этой силы, то электроны непрерывно ускорялись бы электрическим полем, а не двигались со средней постоянной скоростью. Подвижность, следовательно, – мера несвободы электронов.

Из выражения для μ_d вытекает, что чем выше подвижность, тем больше скорость электронов и тем больше плотность тока *j* в электрическом поле *E*, а значит, тем больше удельная электрическая проводимость кристалла. В самом деле:

$$\sigma = \frac{e^2 n \tau}{m} = en \left(\frac{e \tau}{m}\right) = en \mu_d \tag{33}$$

В предположении равенства нулю средней скорости направленного движения электрона сразу же после его соударения можно говорить о том, что если релаксация электрона происходит за время свободного пробега τ_c , то $\tau_=\tau_c$. Последнему равенству соответствует значение

$$\mu_d = \frac{e\tau_c}{m} \tag{34}$$

эквивалентное соотношению (32).

В физическом плане результат (34) имеет следующий наглядный смысл: поскольку электрон передает решетке энергию, накопленную им в поле E за время τ_c в одном столкновении, то при релаксации электрона по энергии за одно столкновение время релаксации τ_c равно времени его свободного пробега. Более реально считать, что релаксация осуществляется не за одно, а за несколько столкновений, но все равно при этом τ_r и τ_c близки друг другу по порядку величины.

В подобной констатации τ_c и $\tau_r(\tau)$ выражения позволяют выразить электропроводность металла как через время свободного пробега

$$\sigma = \frac{ne^2}{m}\tau_c \tag{35}$$

так и через величину свободного пробега

$$\sigma = \frac{ne^2 \lambda_c}{mu} \tag{36}$$

Запись *σ* в формах (35) и (36) справедлива, если считать, что электропроводность электронного газа в металле пропорциональна числу электронов проводимости в единице объема.

Выражение (33) отражает связь σ между n и μ_d : $\sigma = en\mu_d$. Возникает вопрос: для чего одну характеристику металла σ выражать через две другие – концентрации электронов n и подвижность μ_d ?

Подобное связано с тем, что плотность и подвижность электронов проводимости (*n* и μ_d) определяют существенно различные и независимые

характеристики металла. Концентрация свободных электронов в единичном объеме *n* практически не меняется с температурой и не зависит от состояния образца данного металла. Подвижность же характеризует силу сопротивления металла движению электрона, и в зависимости от изменения температуры может изменяться на порядки. Обе характеристики (т.е. *n* и μ_d) допускают их независимое определение. Так, например, для нахождения числа электронов в 1 cm^3 в любом металле с любым валентным числом *Z* целесообразно использовать выражение (16). В то же время для определения подвижности необходимо знание времени свободного пробега τ . Независимая оценка τ крайне сложна. Поэтому в повседневной практике оценка времени релаксации τ осуществляется по экспериментальным данным для средней тепловой скорости или средней длины свободного пробега.

2.4 Электропроводность металлов в моделях Друде и Лоренца

времена Друде (начало 1900 г.) считалось, Bo ЧТО электроны проводимости (или свободные электроны) в роли носителей электричества (или тепла) в металле не имеют объема и хаотически передвигаются между периодически расположенными атомными остатками (ионами) металлического кристалла, т.е. передвигаются (в современном представлении) в объеме (или между узлами) кристаллической решетки, выполненной ионизированными, положительно заряженными ионами соответствующего кристаллического вещества. Появление свободных электронов связывалось с отдачей каждым атомом в «совместное» пользование не менее одного электрона и как следствие, наличием в металле «электронного» газа, для рассмотрения и анализа которого практически без изменений применялись методы кинетической теории нейтральных разряженных газов. Кроме того, в модели Друде были использованы следующие предположения, в основе которых лежал факт упругого столкновения электронов с непроницаемыми и неподвижными ионами:

 в промежутках между столкновениями отсутствует электронэлектронное взаимодействие, т.е. приближение независимых электронов (приближение свободных электронов);

 считается, что в интервалах между столкновениями при наличии внешних электрических полей каждый электрон движется по прямой линии в соответствии с законами Ньютона;

3) электроны испытывают столкновение за единицу времени с вероятностью, равной $1/\tau$, причем после столкновения с ионами электроны отскакивают от них как от твердых шариков. Величина τ при этом представляет собой время свободного пробега или время релаксации. За это время τ электрон проходит расстояние, равное его средней длине свободного пробега *l*. Другими словами, l – это расстояние, проходимое электроном между его двумя последовательно следующими друг за другом «ионными» столкновениями;

4) электрон приходит в состояние теплового равновесия со своей кристаллической решеткой благодаря своим соударениям, причем величина его скорости *и* соответствует температуре той области металлического вещества, где произошло столкновение.

Изложенные выше предположения позволяют выражать электропроводности не через среднее время свободного пробега, а через другие величины, вкладывая в них определенный физический смысл. В этой связи выделяются два выражения для σ , удовлетворяющие предъявляемым требованиям. Первое выражение – это обычное выражение, имеющее вид:

$$\sigma = ne\mu \tag{37}$$

где величина $\mu = e\tau_m/m$ представляет собой дрейфовую подвижность *n* электронов (или дрейфовую скорость, приобретаемую электроном в поле с единичной напряженностью), имеющих одинаковое время свободного пробега τ_m и среднюю дрейфовую скорость u_d .

Второе выражение для σ принято выражать через среднюю длину свободного пробега $\ell_m = u_T \tau_m$ электронов, определяемую как расстояние, проходимое электроном, движущимся с тепловой скоростью u_T , за среднее время свободного пробега τ_m . Отсюда следует, что в модели Друде электропроводность σ может быть записана в виде:

$$\sigma = \frac{ne^2 \tau_m}{m} = \frac{ne^2 \ell_m}{m u_T}$$
(38)

или с учетом соотношения (14), где под u понимается u_T , окончательно:

$$\sigma = \frac{ne^2\ell_m}{\sqrt{3mk_0T}} , \qquad (39)$$

где значение l_m оценивается выражением (22).

В модели Друде все электроны в металле имеют одну и ту же тепловую скорость u_T , от величины которой зависит τ_m . Так же в модели Друде не принималось во внимание изменение распределения скоростей электронов в металле как в отсутствии каких-либо внешних полей, так и при приложении к металлу электрического поля.

Лоренц (1905 г) отказался от упрощения равенства у всех электронов проводимости тепловых скоростей, полагая, однако, что время релаксации проводимости $\tau_r(\tau)$ для каждой точки пространства металла, содержащего электронный газ, совпадает со средним временем свободного пробега τ_m .

При дальнейшем решении задачи Лоренц исходил из трех следующих основных положений:

 электроны упруго рассеиваются на неподвижных ионах кристаллической решетки;

о внешнее постоянное электрическое поле Е действует в течение времени, значительно превышающем τ_m ;

о время релаксации зависит только от величины скорости электрона, но не от направления его движения.

Все это позволило Лоренцу в конечном итоге убедиться в том, что выражение для электропроводности, основанное на упомянутых трех положениях, имеет вид:

$$\sigma = \frac{4ne^2\ell_m}{3\sqrt{2\pi mk_0 T}} \tag{40}$$

и в целом имеет общую форму, совпадающую с таковой в модели Друде (38). При одинаковом определении l_m выражения (38) и (39) различаются только множителем $\sqrt{\frac{3\pi}{8}} = 1,09$.

Следует отметить неспособность теории Друде и Лоренца объяснить реальную длину свободного пробега электронов в металле. Дело в том, что согласно известным расчетам, длина свободного пробега электрона при комнатной температуре в различных металлах составляет от 1 до $10 \stackrel{o}{A}$. Эти результаты сравнимы с межатомными расстояниями и хорошо согласуются с предположением Друде о том, что столкновение электронов объясняется их соударениями с большими непроницаемыми и тяжелыми ионами. В то же время истинная длина пробега электронов при 293 К более значительно и превышает *l* (по Друде). Действительно, в первом приближении реальная длина *l* может быть получена с помощью выражения: $l_{\rho} = u_F \tau_{\rho}$, где $u_F -$ скорость Ферми (см. пункт 4.1), а τ_{ρ} оценивалось по формуле (29) с применением известных результатов по ρ при 77, 273 и 373[°] К. На примере Cu⁺ при указанных температурах *l* уменьшалась от 230 $\stackrel{o}{A}$ (77 [°]K) до 30 $\stackrel{o}{A}$ (273 [°]K) и 20 $\stackrel{o}{A}$ (373 [°]K). Подобная тенденция характерна и для других металлов, явно подчеркивая то

обстоятельство, что электроны не просто соударяются с ионами, как предлагал Друде (по Друде в меди $\ell = 4 \stackrel{0}{A}$).

2.5 Оценка удельного сопротивления металлов с позиции классической теории электронного газа

Согласно классической теории, предполагается, что у металлических проводников внешние электроны атомов могут свободно переходить от атома к атому внутри кристаллической решетки металла. Также предполагается, что эти электроны ведут себя внутри металлического проводника как идеальный газ.

Чтобы вычислить удельное сопротивление металла, принимается, что электронный газ находится в состоянии теплового равновесия и имеет среднюю квадратическую скорость, определяемую уравнением (20):

$$\bar{u_T} = \sqrt{\frac{3k_0T}{m}} \,.$$

Если средняя длина свободного пробега электрона равна l, то среднее время τ между двумя соударениями равно

$$\tau = \frac{\ell}{u_T} = \ell \sqrt{\frac{m}{3k_0 T}} \,. \tag{41}$$

Предположим, что электрон находится в металле с квадратным сечением *S* и длиной *L*, к которому приложена разность потенциалов (напряжение) U. Эта разность потенциалов создает среднее электрическое поле U/L, определяющее силу, действующую на каждый электрон. Эта сила равна:

$$F = eE = \frac{eU}{L} \,. \tag{42}$$

Под действием этой силы электроны приобретают ускорение

$$a = \frac{e}{m} \frac{U}{L}.$$
(43)

Они ускоряются в течение среднего времени τ и приобретают среднюю скорость дрейфа u_d , определяемую формулой

$$u_d = \frac{eU}{2mL} \ell \sqrt{\frac{m}{3k_0 T}} \,. \tag{44}$$

Скорость дрейфа направлена вдоль «квадратного» металла и очень мала по сравнению со скоростью хаотического теплового движения u_T . Действительно, скорость u_d настолько мала, что можно считать, что после каждого соударения электрон начинает снова ускоряться «из состояния покоя», и перенос электронов происходит с дрейфовой скоростью.

Если концентрация (плотность) свободных валентных электронов составляет n на единицу объема, то тогда число электронов, пересекающих в единицу времени плоскость, перпендикулярную оси квадратного брускаметалла, будет определяться как $n S u_d$, а электронный ток выражением

$$i = enS u_d = \frac{e^2 n\ell S}{2mL} \sqrt{\frac{m}{3k_0 T}U}.$$
(45)

Как известно, в соответствии с законом Ома для участка проводника ток *i* через него пропорционален падению напряжения U вдоль оси проводника:

U=*iR*. Сопротивление проводника зависит от его размеров, но не зависит от величины тока или падения напряжения. Поэтому сравнение с законом Ома показывает, что согласно рассматриваемой модели, сопротивление бруска выражается формулой

$$R = \frac{2L}{e^2 n \ell S} \sqrt{3k_0 Tm} \,. \tag{46}$$

Так как $R = \rho l/S$, где ρ – это соответствующее удельное сопротивление, то из нее следует

$$\rho = \frac{2\sqrt{3k_0Tm}}{e^2 n\ell},\tag{47}$$

причем удельная проводимость будет равна

$$\sigma = \frac{1}{\rho} = \frac{e^2 n\ell}{2\sqrt{3k_0 Tm}} \,. \tag{48}$$

Контрольные вопросы

1. Средняя квадратичная скорость, длина свободного пробега и кинетическая энергия свободных электронов в металле.

- 2. Тепловая и дрейфовая скорость свободных электронов в металле.
- 3. Удельное сопротивление и удельная электропроводность металлов.
- 4. Модели Друде и Лоренца.

3 Квантовая теория электропроводности. Зонная модель твердых тел

3.1 Модель свободных электронов в металле. Приближение сильной связи и приближение слабой связи

свободных Теоретическая модель электронов исходит ИЗ представления, что металл содержит свободные электроны, способные передвигаться во всем объеме кристаллической решетки. Положительный заряд структурных ионов, компенсирующих заряд электронов, распределен в металле с равномерной плотностью и создает электрическое поле с постоянным положительным потенциалом V₀. В приближении свободных электронов пренебрегают кулоновскими силами взаимодействия между электронами и структурными ионами кристаллической решетки и считают, что свободные электроны без всяких ограничений перемещаются в любой области металлического образца. Их полную энергию можно считать равной их кинетической энергии, а потенциальную энергию считать равной нулю в предположении равенства нулю потенциала V₀. Подобная модель позволяет рассматривать металл как потенциальную яму (потенциальный ящик), заполненную электронами. Электроны в потенциальном ящике ведут себя как газ невзаимодействующих частиц по двум причинам:

1) при своем движении они не отклоняются ионами, поскольку ионы расположены в правильной периодической трехмерной решетке;

2) электроны проводимости редко испытывают взаимодействие друг с другом.

Что является следствием принципа Паули, который применительно к рассматриваемому случаю формулируется следующим образом: в электронном газе не может быть больше двух электронов, находящихся в одинаковых состояниях, причем собственные моменты импульсов (спины) этих двух электронов должны быть антипараллельны.

Газ свободных, невзаимодействующих электронов, подчиняющихся принципу Паули, получил название свободного электронного газа Ферми, энергетический спектр которых в металле:

$$E_n = n^2 \frac{h^2}{2mL^2} , (49)$$

где L - длина прямой, ограничивающей движения электрона, n - главное квантовое число (= 1, 2, 3...). Из приведенного выражения видно, что этот спектр является дискретным.

Дальнейшее понимание процессов движения электронов проводимости было связано с описанием их поведения в кристаллической решетке твердого тела с помощью двух приближенных методов: приближения сильной связи и приближения слабой связи.

Приближение сильной связи (приближение, исходящее из связанных электронов) состоит В следующем. Рассматривается большое число изолированных атомов, каждый из которых обладает собственной системой дискретных уровней, с одновременным анализом того, что происходит с последними по мере сближения атомов И формирования ИЗ них кристаллической решетки того или иного вещества. При этом исходят из допущения, что энергия связи электронов с атомами соответствующего кристалла значительно больше их кинетической энергии, необходимой для перемещения сквозь решетку. То есть четко понимается сильная связь электронов со своими атомами, а тем самым преимущественное (по времени) нахождение около них (так называемая сильная связь).

Приближение слабой связи (приближение, исходящее из свободных электронов) исходит из предположения, что энергия взаимодействия электрона с решеткой минимальна по сравнению с его кинетической энергией (слабая связь), что позволяет рассматривать электрон в качестве свободного.

Оба рассмотренных приближения приводят к качественно согласующимся результатам при решении задачи о поведении электронов в кристалле. Суть заключатся в следующем: энергетический спектр электронов в твердом теле должен состоять из областей разрешенных энергией (разрешенные зоны) и запрещенных зон, т.е. областей запрещенных энергией. Каждая из зон содержит ограниченное число энергетических уровней, а, следовательно, способна вместить ограниченное число электронов.

Энергетически запрещенные и разрешенные зоны лежат в основе зонной модели твердых тел, и, в частности, зонной модели металлов. Именно представления зонной модели металлов с привлечением квантовой теории позволяют достаточно объективно рассматривать механизмы электропроводности и сопротивления металлических веществ с количественной оценкой соответствующих параметров.

3.2 Общие представления о зонной теории металлов

Энергетическое состояние свободного изолированного атома соотносится с энергетическим состоянием его валентного электрона, время жизни которого в возбужденном состоянии $\tau \sim 10^{-8}$ с. В соответствии с принципом неопределенностей ($\Delta E \tau \geq h$) ширина энергетического уровня, отвечающая возбужденному состоянию валентного электрона, равна:

$$\Delta \mathbf{E} \approx \frac{h}{\tau} \approx 10^{-7} \, \mathbf{y} B$$

При образовании кристалла из изолированных ранее атомов происходит качественное изменение энергетических уровней электронов кристаллообразующих атомов. Это объясняется тем фактом, что в кристалле все электроны приобретают способность переходить от одного атома к другому, при одновременном уменьшении времени их локализации на

определенном атоме до величины $\tau = 10^{-15}$ с. В соответствии с принципом неопределенностей ширина энергетического уровня электрона в кристалле ΔE по порядку величины будет равна:

$$\Delta E \approx 10^{-12}$$
 эрг ≈ 1 эВ

Подобное означает, что энергетический уровень валентных электронов, ширину 10^{-7} эB, имеющий В изолированном атоме превращается В сформировавшемся атомном кристалле в энергетическую зону шириною порядка единиц электронвольт. Таким образом, вместо системы дискретных энергетических уровней энергии, которыми характеризуется отдельный свободный атом, в кристалле из этих атомов, являющихся структурными частицами, появляется система энергетических зон. Такая энергетическая зона не является непрерывным рядом значений энергии электрона, а представляет собой систему дискретных энергетических уровней, т.е. систему, образованную огромным числом непосредственно близко расположенных друг к другу уровней. Если в кристалле размером 1 см³ содержится $n_a \approx 10^{22}$ атомов, то при ширине зоны в 1эВ расстояние между прилегающими уровнями будет равно $\approx 10^{-22}$ эВ. Это расстояние столь ничтожно, что зоны можно считать практически непрерывными. В связи с тем, что число уровней в зоне является конечным, то каждая зона может вместить ограниченное число электронов, являясь тем самым зоной разрешенных энергией. Подобные энергетически разрешенные зоны разделены между собой зонами запрещенных энергий, ширина которых измеряется также единицами электронвольт. Для перехода электрона из нижней энергетической зоны в ближайшую верхнюю зону, так называемую зону проводимости, он должен обладать энергией, достаточной для преодоления запрещенной зоны.

Границы разрешенной зоны задаются условием:

$$k = \pm n \frac{\pi}{a}$$
 (n=1, 2, 3....). (50)

Для конкретной энергетической зоны граничные значения волнового вектора *k*, а, следовательно, и энергии свободного электрона, связанной с волновым вектором (50) равенством:

$$\mathbf{E} = \frac{\pi^2}{2m}k^2 \tag{51}$$

зависят только от расстояния *а* между соседними атомами кристалла в данном направлении. Отсюда следует вывод, что поскольку межатомные расстояния в кристалле могут быть различны, то и ширина энергетической зоны также может быть различна.

Если рассмотреть отдельно взятую разрешенную энергетическую зону, дно которой сопряжено с наинизшим энергетическим состоянием (уровнем), обозначаемом E_{am}. Е_{am} представляет собой энергию электрона на атомной орбите атомов кристаллических решеток тех или иных металлов. При этом следует иметь в виду, что E_{am} не равняется соответствующему энергетическому уровню электрона в свободном атоме, а несколько меньше (под свободными атомами подразумеваются атомы, притягивающиеся друг к другу в процессе Выше формирования конкретного металла). «атомного» уровня Eam расположены атомные энергетические уровни, между которыми происходит переход электронов, соответствующий переходу электронов от атома к атому. Этот переход представляет собой фактическое перемещение электронов в объеме кристаллической решетки металла с некоторой кинетической энергией, называемой трансляционной энергией или кинетической энергией Ферми \mathcal{E}_{F} . Последняя – положительная величина, поскольку она отсчитывается от дна зоны E_{am} . Поэтому ясно, что уровни энергии электронов с \mathcal{E}_F расположены выше E_{am} . Подобные уровни на рисунке, с находящимися на них электронами, получили название занятых. Энергия электронов с наивысшей скоростью трансляционного перемещения называется энергией Ферми. Выше уровня \mathcal{E}_F существует область свободных уровней, наивысший из которых E_{max} соответствует движению электрона с максимально возможной гипотетической E_k . Уровень с E_{max} получил название потолка разрешенной энергетической зоны, физически отражая максимальную энергию в зоне электрона с максимальной Е поступательного движения. В то же время следует учитывать тот факт, что энергия Ферми \mathcal{E}_F представляет собой наибольшую кинетическую энергию «поступательного» движения электронов у верхней границы, разделяющей заполненные и свободные уровни.

3.3 Изображение энергетических зон и заполнение их электронами

Для изображения энергетических зон любого твердого тела обычно применяют энергетическую диаграмму, приведенную на рисунке 8.



Рисунок 8 – Энергетические зоны

Последняя изображается в виде двух разрешенных энергетических зон, между которыми лежит запрещенная зона ΔE , а по вертикали снизу вверх отложены значения полной энергии электронов в кристалле. Нижняя зона

энергий содержит различные уровни валентных электронов, связанных с решеткой и не участвующих в электропроводности. Эта зона носит название валентной зоны E_{ν} (или «заполненной» зоны). Верхняя зона, или зона проводимости Е_с, содержит разные возможные значения энергии электронов проводимости, обуславливающих электропроводность. Наинизшее значение полной энергии электронов проводимости и наивысшая возможная энергия связанных электронов изображается соответственно нижним краем зоны проводимости E_c и верхним краем «валентной» зоны E_v. Тогда энергия ионизации кристаллической решетки (энергия, необходимая для удаления электрона за пределы структурного атома) определяется «энергетическим» расстоянием между краями зон $\Delta E = E_c - E_v$. В электронвольтах величина ΔE собой ширину запрещенной зоны, в представляет пределах которой промежуточные значения энергии не соответствуют никаким возможным движениям электрона. Рассматриваемая стационарным «трехзонная» энергетическая диаграмма отражает зонную модель полупроводников $\Delta E < 3 \Im B$ и диэлектриков $\Delta E \geq 3 \Im B$. В зонной модели металла отсутствует запрещенная зона, т.к. в металлах энергия ионизации структурных частиц кристаллических решеток равна нулю, и поэтому $\Delta E = 0$. Следовательно, на энергетической диаграмме металла реализуется две перекрывающиеся энергетические зона: B3, нижняя валентная зона полностью или частично заполненная зона проводимости ЗП, электронами, верхняя совершенно И пустая (рисунок 9). Между собой они разделены так называемым уровнем Ферми \mathcal{E}_{F} . Верх ЗП эквивалентен потолку разрешенной зоны, а дно валентной зоны – дну РЗ в плане полной реализации одного и того же энергетического спектра электронов.



Рисунок 9 – Металл, диэлектрик и полупроводник по зонной теории

Возвращаясь к рисункам 8 и 9, следует отметить, что каждая энергетическая зона способна содержать определенное число энергетических уровней *n*_{3y}. В соответствии с принципом Паули на каждом таком уровне может разместиться не более двух электронов с противоположно направленными спинами. При дальнейшем рассмотрении зонной модели металла для простоты принято считать, что энергетические уровни в зонах являются «одноэлектронными», т.е. на каждом уровне находится один электрон.

Согласно зонной теории твердых тел энергия электронов в твердом теле практически равна энергии электрона в свободных атомах. При межатомном расстоянии, соответствующем реальным кристаллическим решеткам, происходит непрекращающийся переход валентных электронов от атома к атому, т.е. имеет место фактическое перемещение электронов в межрешеточном пространстве с трансляционным импульсом p_{T} , обладая при этом практически одинаковой свободой движения в том смысле, что на трансляционное движение валентного электрона не влияет его взаимодействие с нарушенной решеткой ионов. Следовательно, этому процессу должна соответствовать трансляционно-кинетическая энергия E_F , связанная с p_m известным соотношением

$$E_F = \frac{1}{2m} p_T^2 \tag{52}$$

использование которого допустимо при условии, что электроны заполняют только часть зоны и на электрон приходится

$$E_F = \frac{3}{5}\varepsilon_F$$
.

Уровни энергии электронов, обладающих кинетической энергией перехода от атома к атому, расположены выше E_{amos} . Эти электроны при T=0 K и выше находятся на энергетических уровнях, называемых занятыми (заполненными), начиная с самого нижнего (нулевого) вплоть до некоторого уровня, энергия которого определится распределением энергетических уровней внутри зоны и заполнением этих уровней электронами. (В рамках классической теории считается, что при 0 К и в отсутствии внешних возбуждений энергия всех свободных электронов равна нулю, т.е. все они находятся в одинаковом состоянии).

3.4 Функция распределения Ферми-Дирака *f*(*E*). Понятие уровня и энергии Ферми

Анализ энергетических, оптических, тепловых и ряда других свойств металлов возможен, если знать закон распределения электронов по энергии. Это распределение свободных электронов в металле получено методами квантовой статистики Ферми-Дирака, для описания которого была введена так называемая функция Ферми

$$f \, \mathbf{E} = \left[\exp(\frac{\mathbf{E} - \varepsilon_F}{k_0 T}) + 1 \right]^{-1} \tag{53}$$

определяющая вероятность заполнения электроном энергетического уровня с энергией E в условиях термодинамического равновесия электронов в системе. Величина \mathcal{E}_F в f(E) называется энергией Ферми (или уровнем Ферми). Выясним физический смысл величины энергии \mathcal{E}_F , рассматривая функцию Ферми при температуре абсолютного нуля.

Если температура металла T=0 K, то для $E < \mathcal{E}_F$ функция f(E) стремится к единице $f(E) \rightarrow I$, а для $E > \mathcal{E}_F$ функция $f(E) \rightarrow 0$. Таким образом, при абсолютном нуле температур в интервале энергий от 0 до \mathcal{E}_F функция Ферми f(E)=1. При переходе через \mathcal{E}_F она скачкообразно падает до нуля. Это означает, что при T=0K свободные электроны занимают все дозволенные энергетические уровни вплоть до энергии \mathcal{E}_F (вероятность их заполнения равна 0). Соответствующий график функции f(E) при T=0 K изображен на рисунке 10, из которого видно, что, действительно, все уровни с $E < \mathcal{E}_F$ заполнены электронами, а уровни с $E > \mathcal{E}_F$ – вакантны. Следовательно, энергия Ферми \mathcal{E}_F представляет собой максимальную энергию, которую могут иметь свободные электроны при абсолютном нуле, оказавшись на самом последнем из «заполненных» уровней, выше которого имеются совершенно сводные (т.е. «безэлектронные») уровни.



Рисунок 10 – Функция распределения Ферми-Дирака

Вот с этим наиболее «высокоэнергетическим заполненным» уровнем и отождествляется уровень Ферми. Так как квантовые переходы в кристаллах имеют место между реальными одноэлектронными состояниями, то в действительности уровнем Ферми называют конкретное состояние, которым заканчивается заполнение энергетических уровней (состояний). Поэтому энергия \mathcal{E}_F – это энергия, соответствующая наивысшему энергетическому уровню, занятому электроном в металле при 0°*K*. Строго говоря, энергия Ферми является константой. Она в значительной мере характеризует электрические свойства металлов. Действительно, если \mathcal{E}_F – энергия наивысшего занятого состояния при T = 0°*K* в каком либо металле, содержащем в единице своего объема n_0 – число электронов, то энергия Ферми при температуре абсолютного нуля определяется выражением

$$\varepsilon_{F0} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{3n_0}{\pi}\right)^{\frac{3}{2}}$$
(54)

из которого следует, что \mathcal{E}_{F}^{0} (в дальнейшем просто \mathcal{E}_{F}) монотонно возрастает с увеличением плотности электронного газа n_{0} .

3.5 Среднее значение энергии Ферми. Температура Ферми. Тепловое возбуждение электронов и анализ их распределения

Выше уровня Ферми существует область возможных энергетических состояний, соответствующих поступательному движению электрона вплоть до самого наивысшего уровня с максимальной энергией E_{max} , называемого потоком энергетической зоны. Наличие максимальной энергии E_{max} вытекает из факта содержания в зоне конечного числа уровней $n_{\Im y}$ между E_{amom} и E_{max} уровнями, т.е. между дном и потолком разрешенной зоны.

Выше подчеркивалось, что энергия Ферми или уровень Ферми – это максимальная энергия электрона на последнем еще занятом энергетическом уровне при T = 0. Физически это отражает тот факт, что при абсолютном нуле энергия электронов отлична от нуля, заполняет все допустимые уровни энергии вплоть до самого энергетически наивысшего уровня – уровня Ферми. Заселенность данного интервала энергетических уровней носит название плотности состояния $\rho_{(E)}$.

Кривая распределения свободных электронов по энергиям при $T = 0^{\circ} K$ $\rho_{(E)} = \frac{dn}{dE}$ при значениях энергии E, лежащих в пределах от дна до потолка разрешенной зоны, приведена на рисунке 11. Из этого рисунка непосредственно следует, что кинетическая энергия свободных электронов при абсолютном нуле не равна нулю: она меняется от значений близких к 0 до \mathcal{E}_{F} .

Как показал расчет, среднее значение энергии электрона в зоне при описанном виде функции распределения $\rho_{(E)}$, приведенной на рисунке 11, равно

$$\bar{\mathrm{E}} \, \mathbf{\xi}_{cp} \, \mathbf{\hat{=}} \, \frac{3}{5} \, \boldsymbol{\varepsilon}_{F} \, . \tag{55}$$



Рисунок 11 – Кривая распределения свободных электронов по энергиям

Таким образом, среднее значение трансляционной энергии электрона в идеальном распределении электронов по энергиям равно трем пятым кинетической энергии Ферми. Полная трансляционная энергия всех N электронов в P3 (т.е. энергия электронного газа) равна, следовательно,

$$\mathbf{E} = \frac{3}{5} \,\mathbf{N} \,\varepsilon_F \,. \tag{56}$$

Из соотношения (54) непосредственно следует: энергия Ферми тем больше, чем больше плотность электронов *n* В металлах энергия ε_F электронов проводимости значительно больше средней тепловой энергии Θ_T при комнатных температурах ($k_0T = \Theta_T = 0.026 \ \beta B$), более низких и более высоких (например, при $T=3670^0$ K, равной температуре плавления вольфрама $\Theta_T=0.3$ βB).

Таким образом, во всех металлах энергии Ферми $\varepsilon_F >> \theta_T = k_0 T$, что свидетельствует о независимости энергии частиц электронного газа от температуры. Подобное состояние системы электронов, как отмечалось выше, называется вырожденным, а, следовательно, электронный газ в металлах является вырожденным газом. Он будет оставаться вырожденным до тех пор, пока энергия тепловых колебаний кристаллической решетки k_0T станет не меньше энергии Ферми, т.е. когда $k_0T \ge \varepsilon_F$. Температура, при которой происходит выполнение этого условия, носит название фермиевской температуры или температуры Ферми:

$$T_F = \frac{\mathcal{E}_F}{k_0} \,. \tag{57}$$

Ниже этой T_F электронный газ переходит из невырожденного состояния в вырожденное. Значение T_F для ряда металлов приведены в таблице 7, из

данных которой видно, что при всех практически возможных T_F газ в металлах находится в вырожденном состоянии. Можно оценить ту температуру T_{κ} , при которой вырождение электронного газа в металлах снимается. T_{κ} определяется выражением $n^{2/3} \cdot h^2/(2\pi m\kappa_0)$ и после подстановки в эту формулу входящих в нее параметров дает величину 5 ·10⁴K.

На рисунке 12 показана зависимость энергии электронного газа от температуры. При температурах выше T_F электронный газ является невырожденным и его энергия, как и энергия обычного газа, меняется пропорционально T.



Рисунок 12 – Вырождение электронного газа

Ниже T_F электронный газ становится вырожденным, и его энергия и скорость движения электронов практически перестают зависеть от температуры Т. При T > 0⁰ K, т.е. с повышением температуры электроны подвергаются тепловому возбуждению, благодаря которому часть из них переместится на более высокие энергетические уровни с одновременным при этом освобождением части состояний ниже уровня Ферми. Следует сразу же обратить внимание на следующий исключительно важный факт: при повышении *T* от 0⁰ K в интервале температур, в котором энергия теплового

движения $k_0 T = \theta_T$ остается значительно меньшей энергии Ферми, т.е. в котором выполняется условие

$$k_0 T < \mathcal{E}_F \tag{58}$$

тепловому возбуждению могут подвергаться лишь электроны, находящиеся в энергетической полосе толщиной порядка k_0T , непосредственно расположенной у уровня Ферми. Электроны же более глубоких уровней остаются фактически незатронутыми, поскольку энергия теплового движения θ_T недостаточна для их возбуждения, а тем самым, для перевода за уровень Ферми.

После перехода электронов на уровни с энергией, несколько большей V_k , устанавливается новое распределение электронов при данной (и любой) T по энергетическим состояниям, которые даются функцией распределения Ферми-Дирака f(E) (рисунок 13). На этом рисунке сплошной линией показана f(E) при $T \neq 0$. удовлетворяющая условию (58), а пунктиром – показана кривая распределения электронов при 0 К (см. рисунок 13).



Рисунок 13 – Зависимость функции Ферми-Дирака от энергии

При любых температурах T > 0 *K*, если:

1) $E = \varepsilon_F$, to $f(E) = \frac{1}{2}$; 2) $E > \varepsilon_F$, to $f(E) < \frac{1}{2}$; 3) $E < \varepsilon_F$, to $f(E) > \frac{1}{2}$.

Наиболее интересным является первый случай. Это связано с тем обстоятельством, что в литературе величину ε_F , равную E_F также принято называть «энергией Ферми», подразумевая под ней ту энергию, при которой функция распределения f(E), отвечающая равновесному (наивероятнейшему) состоянию свободных электронов, равна 1/2. Следовательно, «энергии Ферми» ε_F соответствуют квантовые состояния, вероятность (средняя степень) заполнения которых равна половине или, что то же самое, заполнены в среднем наполовину.

Из рисунка видно, что кривые f(E) при T = 0K и T > 0 Котличаются друг от друга только характером спада правых частей: при T = 0K спад кривой (пунктирная кривая)происходит резко, скачкообразно по вертикальной прямой $D\varepsilon_F$, в то время как при $T > 0^{\circ}K$ спад протекает по относительно плавной кривой ABC. Это как раз и отражает тот факт, что при температурах, удовлетворяющих условию (57), тепловому возбуждению подвергаются электроны тех уровней полосы, k_0T которая расположена ниже уровня Ферми. Если N – число свободных электронов в киломоле металла (число электронов проводимости в cm^3), то число уровней в полосе k_0T равно

$$n_{y} = \frac{k_{0} \mathrm{T}}{2\varepsilon_{F}} \mathrm{N}$$
(59)

отстоящих друг от друга на одинаковых расстояниях

$$\Delta E = \frac{2\varepsilon_F}{N} \tag{60}$$

При нахождении на энергетическом уровне одного электрона (реализация одноэлектронных уровней) и поглощении им при термическом возбуждении энергии, по порядку величины равной k_0T , число электронов, испытывающих термический переход через уровень Ферми, сопоставимо с n_y , а, следовательно, определяется выражением (59).

Было установлено, что во всем диапазоне температур, в котором электронный газ в металле является вырожденным, его распределение практически не отличается от распределения при $T = 0^{\circ}K$, а тепловому возбуждению из полосы шириной k_0T подвергается лишь незначительная доля электронов. В частности, при 300 К эта доля составляет меньше 1 % от общего числа электронов проводимости.

Контрольные вопросы

- 1. Варианты зонной структуры металлов.
- 2. Границы разрешенной зоны валентных электронов.
- 3. Уровень и энергия Ферми.
- 4. Функция распределения Ферми-Дирака.
- 5. Вырожденное и невырожденное состояния электронного газа.

4. Анализ и оценка параметров Ферми в к-пространстве

4.1 Постановка задачи

Согласно зонной теории металлов, электроны, находящиеся в зоне проводимости, имеют практически равную свободу движения. В отсутствие внешнего электрического поля подобное движение не способно привести к возникновению электрического тока (электрической проводимости) в связи с тем, что распределение электронов по скорости является симметричным, т.к. каждому электрону в кристаллической решетке, который движется с данной скоростью в данном направлении, может быть сопоставлен электрон, имеющий такую же скорость по величине, но прямо противоположную по направлению.

При нахождении металла в электрическом поле E на каждый электрон действует сила F = eE, в результате чего появляется преимущественное движение электронов, а тем самым, возникновение электрического тока. В рамках зонной модели металла это отвечает перемещению электронов с занятых ими уровней, через уровень Ферми, с изменением своей энергии, попав на свободные уровни. Другими словами, это переход электронов в новые квантовые состояния с меньшей или большей энергией. Вполне понятно, что подобные переходы способны осуществляться лишь в том случае, если в ЗП (или, то же самое, в разрешенной зоне) имеются свободные энергетические уровни (подробно этот механизм рассмотрен в разделе 3).

В свою очередь, легкость электронного перехода на свободные уровни хорошо объясняется незначительной разницей (порядка $10^{-22} \Im B$) между энергией свободных состояний и энергий занятых уровней в разрешенной зоне или зоне проводимости. Поэтому уже слабое энергетическое поле способно сообщить электронам заполненных уровней достаточный добавочный импульс, чтобы перевести их на рядом лежащие свободные уровни. В результате появляется доминирующее перемещение электронов против поля, которое и

обуславливает возникновение электрического тока, т.е. электропроводность металла. Так например, при напряженности внешнего поля порядка *100В/см* электрон получает на длине своего свободного пробега, равного 1,0 – 100 $\overset{\circ}{A}$, энергию $\approx 10^{-4} - 10^{-6}$ эВ; если сравнить с энергетическим расстоянием $\approx 10^{-22}$ между рядом расположенными заполненными и свободными уровнями, то появление σ в металле очевидно. Поэтому необходимы анализ и оценка фермиевских параметров, к которым в первую очередь относятся энергия, скорость, импульс, радиус и площадь Ферми $(\varepsilon_{F}, u_{F}, p_{F}, k_{F}, S_{F})$, а также температура Ферми. Все эти параметры используются для описания основного состояния свободных и независимых электронов. Именно с помощью этих параметров, введенных в базовые выражения для σ и ρ , осуществляется расчет электропроводности и электросопротивления металлов и предложены соответствующие соотношения и формы, широко применяемые при решении практических задач.

4.2 Сфера и радиус Ферми. Конкретизация энергии Ферми

В кристалле (бесконечном в трех измерениях) мысленно выделим микроскопический объем V_k в форме кубика с ребрами, направленными из начала координат вдоль координатных осей X, V, Z. Будем считать, что в исходном бесконечном кристалле, составленном из таких кубиков, происходит движение электрона проводимости путем его непрерывного перемещения из кубика в кубик, имеющих одинаковые ребра L. Согласно теоретическим представлениям, энергия движущегося электрона, его импульс $P = \hbar k$ и скорость $\upsilon = \hbar k/m$ пропорциональны волновому вектору k:

$$E_{\kappa} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{P^2}{2m} , \qquad (61)$$

где
$$k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2$$
 (62)

a
$$P^2 = P_x^2 + P_y^2 + P_z^2$$
 (63)

В этих выражениях $k = 2\pi n/L$ имеют определенные дискретные значения, а компоненты самого волнового вектора \overrightarrow{k} для конкретного кристалла должны иметь вид:

 $k_x = \frac{2\pi n_x}{L}, k_x = \frac{2\pi n_y}{L}, k_z = \frac{2\pi n_z}{L}, n_x, n_y, n_z$ – целые числа, реализуясь в виде декартовых осей k_x, k_y, k_z в трехмерном пространстве, которое носит название k – пространства (или пространство импульсов, т. е. р – пространство).

Поскольку L – характерный параметр кристалла, равный длине ребра кубика, то поэтому расстояние между двумя соседними точками в k – пространстве, соответствующими состояниям электрона и расположенными на одной из трех координатных декартовых осях, будет равно:

$$\Delta k = \frac{2\pi}{L},\tag{64}$$

т.е. будет тем меньше, чем больше размеры будет иметь кубик с ребром L. Следовательно, можно говорить о том, что точки, изображающие состояние электрона в кристаллической решетке объемом V, должны с равномерной плотностью заполнять k – пространство (см. рисунок 19) при условии, что каждая из разрешенных точек окружена кубической ячейкой объемом

$$(2\pi/L)^3 = (2\pi)^3/V$$

В рассматриваемом контексте введенное положение условий периодичности вектора *k* автоматически приводит к дискретности энергии выражения:

$$\mathbf{E} = \frac{\hbar^2 n^2}{2mL^2} \tag{65}$$

причем для численного значения вектора *k* должно быть справедливо выражение:

$$k = \frac{2\pi n}{aN^{\frac{1}{3}}},$$
 (66)

где n – целые числа; N – число элементарных ячеек в объеме L^3 ; a – постоянная элементарной ячейки.

Если в объеме *V* заключено n_{\Im} электронов, не взаимодействующих друг с другом (т.н. приближение независимых электронов), то в единице объема k – пространства число разрешенных значений точек \overrightarrow{k} равно *V*/8 π^3 .

Следовательно, в основном состоянии системы из n_3 свободных электронов занятые состояния можно описывать точками внутри некоторой сферы в k – пространстве. В свою очередь, из (62) видно, что все точки k – пространства, находящиеся на одинаковом расстоянии от начала координат, имеют одну и ту же энергию, поскольку выражение (64) не зависит от направления \vec{k} . Следовательно, можно говорить о поверхности постоянной энергии или о поверхности сферы, причем энергия, соответствующая последней (т.е. поверхности сферы), является энергией Ферми. Так как энергии Ферми соответствуют определенные значения волновых векторов электронов k, то вполне ясно, что волновые векторы, оканчивающиеся на поверхности сферы, имеют длины, равные k_F (т.н. волновой вектор Ферми), а сама поверхность называется поверхностью Ферми. Вид этой поверхности существенным образом сказывается на энергетических и других свойствах металла. В частности, в рассматриваемом случае она является сферой. С физической точки зрения это предполагает, что в системе из n_3 свободных электронов в основном состоянии занятые индивидуальные электронные состояния (точки в k – пространстве) полностью занимают сферическую область с радиусом k_F это радиус Ферми или фермиевский радиус той поверхности сферы, которая в этом случае является сферой в k – пространстве. Тогда поверхность сферы Ферми с радиусом сферы k_F

$$S_F = 4\pi k_F^2 \tag{67}$$

есть граница между занятыми (заполненными) и незанятыми (незаполненными) уровнями в k – пространстве.

Если в единице объема металла электронная плотность равна n_0 (концентрация валентных электронов или электронов проводимости), то при T = 0 внутри сферы будут заняты все состояния с волновыми числами, не превосходящими k_F . Уровни с k, превышающими k_F , остаются свободными (незаполненными).

Остановимся на зависимости ε_F от Т и электронной плотности n_0 . Величина энергии Ферми ε_F привязана к температуре $T = 0 \ K$. При дальнейших исследованиях было установлено, что в металлах, где плотность электронов проводимости порядка $10^{22} cm^{-3}$ и выше, энергия Ферми ε_F при произвольной (но удовлетворяющей требованию $k_0T <<\varepsilon_F$) температуре:

$$\varepsilon_{FT} \approx \varepsilon_F \left[1 - 0.82 \left(\frac{k_0 T}{\varepsilon_F} \right)^2 \right],$$
(68)

где ε_F определяется состоянием (54).

Так как вплоть до точки плавления металла тепловая энергия k_0T остается намного меньше ε_F , то уменьшение ε_{FT} с ростом T оказывается относительно незначительной, что во многих случаях можно не учитывать энергию Ферми и при любой температуре считать равной энергии Ферми при температуре абсолютного нуля.

В случае, если электронная плотность достаточно мала ($n_0 \le 10^{19}$), говорят о реализации так называемого «классического предела», которому отвечает распределение Ферми-Дирака при $T \ne 0$ К (T >> 0 К)

$$f \bigoplus \exp\left(\frac{\varepsilon_F}{k_0 T}\right) \cdot \exp\left(-\frac{E}{k_0 T}\right),$$
 при $E \ge 0$ (69)

а соответствующая энергия Ферми определяется выражением

$$\varepsilon_{F} = k_{0} T \ell n \left[\frac{4\pi^{3} \hbar^{3} n_{0}}{\left(2m\pi k_{0} T\right)^{\frac{3}{2}}} \right]$$
(70)

которая оказывается теперь чувствительной к изменению температуры.

4.3 Анализ и оценка Ферми параметров в металле

Ранее был введен и проанализирован радиус Ферми k_F , являющийся радиусом поверхности (области), которую занимают система из *N*свободных электронов, находящихся в основном состоянии. С другой стороны, величина радиуса Ферми полностью совпадает с величиной волновых векторов, «упирающихся» в поверхность сферы, имеющих длины, равные k_F . Отсюда следует, что в этом случае радиус Ферми должен определяться из соотношения

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} k_F^2, \qquad (71)$$

где ε_F — это энергия электрона с волновым вектором длиной k_F , оканчивающимся на поверхности сферы.

В электропроводности металлов принимают участие только те электроны, энергия которых близка к энергии Ферми ε_F , и тогда волновой вектор такого электрона должен определяться из выражения (71) как

$$k_F = \frac{\sqrt{2m\varepsilon_F}}{\hbar} \ . \tag{72}$$

Наряду с приведенным выражением для оценки радиуса Ферми используется соотношение

$$k_F = (3\pi^2 n_0)^{\frac{1}{3}}$$
(73)

свидетельствующее, что k_F зависит лишь от концентрации электронов и не зависит от их массы. Подстановка (71) в (73) приводит к формуле для энергии Ферми в виде

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n_0)^{\frac{2}{3}}.$$
 (74)

Данное соотношение устанавливает зависимость энергии Ферми от концентрации электронов n_0 и от их массы. В рамках зонной модели ε_F отсчитывается от дна разрешенной зоны вплоть до уровня Ферми. В подобном приближении энергия ε_F — это максимальная энергия электронов при T = 0K, достигаемая ими при таком распределении, когда полностью выполняется

соотношение (74), причем соответствующая концентрация свободных электронов в металле

$$n_0 = \frac{(2m)^{\frac{3}{2}}}{3\pi^2 \hbar^2} \varepsilon_F^{\frac{3}{2}} .$$
 (75)

Импульс электронов

$$P_F = \hbar k_F = (3\pi^2 n_0)^{\frac{1}{3}} \cdot \hbar$$
 (76)

находящихся на уровнях с наиболее высокой энергией ε_F , называют импульсом Ферми.

Скорость электронов, находящихся на уровне Ферми (т.е. скорость Ферми u_F)

$$u_F = \sqrt{\frac{2\varepsilon_F}{m}} \tag{77}$$

определяется соотношением

$$\frac{1}{2}mu_F^2 = \varepsilon_F \tag{78}$$

 $(u_F$ по порядку величины равна $10^8 c_M/c)$.

С другой стороны, используя выражение для скорости микрочастицы в состоянии с волновым вектором k ($u_F = \hbar k/m$), для скорости электронов на поверхности Ферми получим

$$u_F = \frac{\hbar k_F}{m} = \frac{\hbar}{m} (3\pi^2 n_0)^{\frac{1}{3}}.$$
 (79)

В любом случае следует иметь в виду, что скорость Ферми играет в теории металлов роль, аналогичную тепловой скорости $u_T = (3k_0T/m)^{12}$ в классическом газе.

Параметры поверхности Ферми для ряда металлов, вычисленные для модели свободных электронов массой $m = 9,11 \cdot 10^{-28}$ г в k – пространстве, приведены в таблице 7. При расчете k_F выражалось в cm^{-1} , $u_F - B CM/C$, $\varepsilon_F - B$ эВ, $T_F - B K$, а в качестве исходных выражений бы использованы выражения (73), (79), (72), трансформированные в рабочие формулы

$$k_F(cM^{-1}) = (29,609 n_0)^{\frac{1}{3}} \cdot 10^8, \qquad (80)$$

$$u_F(CM/c) = 1,158\kappa_F \cdot 10^8$$
, (81)

$$\varepsilon_F(\Im B) = 0,284 \cdot 10^{-15} \cdot u_F^2, \tag{82}$$

$$T_F(^{\circ}K) = 1,16\varepsilon_F(\Im B) \cdot 10^4$$
(83)

Наряду с этими рабочими формулами можно использовать удобные для практического применения и дающие эквивалентные результаты формулы

$$k_F(cM^{-1}) = \frac{3.63}{r_s / a_0} \cdot 10^8 , \qquad (84)$$

$$u_F(cM/c) = \frac{4.2}{r_s/a_0} \cdot 10^8 , \qquad (85)$$

$$\varepsilon_F(\Im B) = \frac{50.1}{\left(r_s / a_0\right)^2} , \qquad (86)$$

$$T_F(^{\circ}K) = \frac{58.2}{(r_s/a_0)^2} \cdot 10^4, \qquad (87)$$

в которых значения безразмерного параметра r_s/a_0 приведена в таблице 5.

Численные значения параметров Ферми для некоторых металлов в к – пространстве приведены в таблице 7.

Элемент	$1 10^8 \text{ or } t^{-1}$	$= 10^8 cm/c$	C D	T $10^4 \circ \mathbf{z}$
JICMCHI	K_F , 10 CM	$u_{\rm F}, \cdot 10^{-c_{\rm SM}/c}$	<i>с_F</i> , ЭВ	$\mathbf{r}_{F}, \cdot 10$ K
Li	1,11	1,29	4,72	5,48
Na	0,,92	1,07	3,23	3,75
K	0,75	0,86	2,12	2,46
Rb	0,7	0,81	1,85	2,15
Cs	0,64	0,75	1,58	1,83
Си	1,36	1,57	7,0	8,12
Ag	1,20	1,39	5,48	6,36
Au	1,20	1,39	5,51	6,39
Be	1,93	2,23	14,14	16,41
Mg	1,37	1,58	7,13	8,27
Fe	1,71	1,98	11,1	13,0
Mn	1,7	1,96	10,9	12,7
Zn	1,57	1,82	9,39	10,9
Al	1,75	2,02	11,63	13,49
Sn(серое , белое)	1,62	1,88	10,03	11,64
Pb	1,57	1,82	9,37	10,87

Таблица 7 – Рассчитанные параметры Ферми k_F , u_F , ε_F и T_F .
4.4 Анализ и оценка некоторых параметров Ферми в Р-пространстве

Для решения вопроса о динамике движения электрона с точки зрения P – пространства будем исходить из предположения, что средняя скорость – теплового движения электронов u почти не зависит от температуры металла и приблизительно равно $10^8 cm/c$. В дальнейшем будем ее обозначать так:

$$\bar{u} = u_F = \frac{P_F}{m}$$
(88)

и называть u_F – фермиевской скоростью, а P_F – фермиевским импульсом.

С учетом сделанных замечаний выражения для σ (базовой формулы: $\sigma = ne^2 \ell / mu$) удобно переписать через фермиевский импульс:

$$\sigma = \frac{ne^2\ell}{P_F} , \qquad (89)$$

где под P_F понимается произведение $mu = mu_F$.

При этом индекс «ғ» у импульса поставлен, чтобы подчеркнуть, что доминирующую роль в процессе переноса заряда в металлах играют электроны с энергией, равной фермиевской энергии ε_F . Считается, что при T = 0 *К* электроны заполняют в импульсном пространстве (Р – пространстве) сферу. Ее называют ферми – сферой, а электроны ферми газа при абсолютном нуле температуры полностью заполняют сферу радиуса P_F .

В геометрическом плане сфера – геометрическое место точек в пространстве импульсов, описываемых уравнением:

$$P_F^2 = P_x^2 + P_y^2 + P_z^2 = 2m\varepsilon_F,$$
(90)

причем сам импульс P_F также имеет простой геометрический смысл в P – рпространстве: P_F – радиус ферми сферы. В тоже самое время радиус фермисферы тем больше, чем больше плотность электронов. В рассматриваемом контексте точное выражение радиуса ферми–сферы:

$$P_F = \left(\frac{3n}{8\pi}\right)^{\frac{1}{3}}h\tag{91}$$

и энергии Ферми

$$\varepsilon_F = \frac{P_F^2}{2m} = \left(\frac{3n}{8\pi}\right)^{\frac{2}{3}} \frac{h^2}{2m}.$$
 (92)

Электроны проводимости в металле обладают спином 1/2 и носят название вырожденного ферми-газа. Т.е. такие электроны подчиняются статистике Ферми-Дирака, а так как импульс Ферми был введен как $P_F = mu_F$, то можно говорить о независимости характеристик теплового движения электронов от температуры. Последнее обстоятельство отражает наиболее удивительные квантовые свойства электронного газа, у которого средняя энергия, средний импульс и средняя скорость практически не зависят от температуры. В связи с этим при расчете можно пользоваться средними значениями последних при T = 0 *К*. В частности, если вместо *n* в выражениях для фермиевского импульса – радиуса ферми–сферы и фермиевской скорости u_F подставить значение числа электронов в единице объема элементарной ячейки V_{39} , равное

$$n = \frac{Z}{a^3}, \tag{93}$$

где a^3 – это объем, который приходит на атом металла, a – линейный размер ячейки кристалла – среднее расстояние между структурными ионами решетки металла, а число Z, как правило, совпадает с валентностью иона, то получим

$$P_F = \left(\frac{3Z}{8\pi}\right)^{\frac{1}{3}} \frac{h}{a} \tag{94}$$

а фермиевская скорость:

$$u_F = \left(\frac{3Z}{8\pi}\right)^{\frac{1}{3}} \frac{h}{am} \approx 10^8 \ cm/c \ . \tag{95}$$

Контрольные вопросы

- 1. Поверхность Ферми.
- 2. Радиус сферы Ферми.
- 3. Энергия и импульс электронов на уровне Ферми.
- 4. Пространства волновых векторов и импульсов.

5. Расчетно-практическая оценка электропроводности и электросопротивления металлов

5.1 Правило Маттисена

Выше отмечалось, что электронный газ в металлах является заметно вырожденным, принципиально отличаясь от свойств классического идеального электронного газа. Определяющим признаком вырожденного газа служит независимость энергии электронов от температуры. Другими словами, в этом случае концентрация электронов также не зависит от температуры. Подобная ситуация сохраняется до тех пор, пока электроны «электронного газа» не начнут взаимодействовать с кристаллической решеткой. Такой процесс взаимодействия представляет собой в самом общем виде процесс рассеяния. В металлах рассматривается рассеяние электронов на:

а) тепловых колебаниях решетки - т.н. электрон-фононное рассеяние или рассеяние электронов на фононах, обладающих максимальной энергией $\hbar\omega$;

б) примесных дефектах кристаллической решетки (посторонние атомы (ионы), находящихся как в междоузлиях структуры, так и в позиции замещения структурных частиц);

в) механических деформациях решетки (дислокации, тепловые дефекты и т.п.).

Экспериментально был установлен факт, что вклады в удельное сопротивление *р* металлов обусловлены вышеприведенными тремя основными причинами, отражающими так называемое правило Маттисена, которое записывается в виде:

$$\rho = \rho_{men\pi} + \rho_{npum} + \rho_{\partial e \phi o p} \tag{96}$$

При этом предполагается, что поведение электросопротивления *ρ*, описываемое правилом Маттисена, полностью определяется физической природой всех трех механизмов рассеяния.

Выражение (96) принято записывать в виде

$$\rho = \rho_{\rm T} + \rho_{ocm}, \qquad (97)$$

где ρ_T – представляет собой удельное сопротивление, обусловленное тепловыми колебаниями решетки (рассеяние электронов на фононах), а ρ_{ocm} (остаточное ρ) – с рассеянием электронов на примесях и деформациях.

Остаточное удельное ρ в практически важных металлах имеет место в области низких температур (< 10 – 20 K) и поэтому в реальных расчетах не учитывается. Таким образом, можно говорить о преобладающем в металлах электрон – фононном рассеянии, т.е. принимать во внимание значение ρ_T . В физическом плане и самом общем представлении принято считать, что число взаимодействий электронов с тепловыми колебаниями решетки (число актов рассеяния) пропорционально числу рассеивающих центров, и в случае электрон–фононного взаимодействия (т.е. рассеяния) число последних равно числу фононов.

5.2 Расчетно-практическая оценка электросопротивления р

Электросопротивление определяется соотношением

$$\rho = \frac{\mathrm{E}}{j},$$

вытекающим из (6), и в случае классического электронного приближения значение *р* в разных металлах сводится к количественному различию

концентраций электронов. В рамках квантовых представлений необходимо учитывать рассеяние носителей заряда электрического тока, что количественно ведет к существенно качественным изменениям в поведении электронов из-за их взаимодействия с фононами.

Эти качественные изменения связаны с наличием двух температурных низкотемпературной областью областей _ И высокотемпературной, определяемыми соответственно условиями $T < \theta$ и $T > \theta$, где под θ понимается температура Дебая. Между собой области отличаются механизмами электрон-фононного рассеивания: при низких температурах электрон-фононные рассеяния проявляются в неупругом рассеянии на малые углы, а при высоких температурах способствует квазиупругому рассеянию на большие углы. При низких T энергия фонона сравнима с $k_0 T$ ($\varepsilon_F \approx k_0 T < k_0 \theta$), рассеяние не является упругим и за время релаксации происходит примерно $\left(\frac{\theta}{\tau}\right)^2$ столкновений. В свою очередь, при температурах выше θ угол рассеяния численно равен $\approx \frac{T}{\rho}$, а число столкновений за время, равное времени релаксации при $T > \theta$, порядка единицы.

Разница в числе электрон-фононных столкновений привела исследователей к двум формулам $\rho(T)$, справедливым при низких температурах ($T < \theta$)

$$\rho \P = 497.6 \chi \left(\frac{\mathrm{T}}{\theta}\right)^5 \tag{98}$$

и высоких температурах ($T > \theta$)

$$\rho|\mathbf{T}| = \chi \frac{\mathbf{T}}{\theta} \tag{99}$$

Последнее соотношение отражает известную «экспериментальную» линейную зависимость ρ от T при высоких температурах, справедливую вплоть до температур $T \approx 2\theta/3$ (т.н. высокотемпературное приближение).

Из соотношений (98) и (99) для $\rho(T)$ вытекает, что получение численных результатов по электросопротивлению определяется конкретным знанием параметра χ . В настоящее время просматриваются три подхода к физической трактовке этого параметра и его оценке: экспериментальный и чисто расчетный; в случае экспериментального подхода под χ понимается сопротивление металла при температуре $T = \theta$. Это означает, что определив независимые методом ρ не при 273 или 293 К, а при $T = \theta$, можно уверенно просчитать удельные ρ как функцию температуры для анализируемого металла.

Второй и третий подходы (условно) являются чисто теоретическими при нахождении $\rho(T)$. Так, например, во втором случае χ задается выражением:

$$\chi = 24 \frac{\hbar^3}{e^2 k_0 n_a^{2/3} \theta M^{1/3}}$$
(100)

а в третьем случае

$$\chi = \frac{a}{u_F} \frac{k_0 \theta}{\mathrm{M}u_{_{36}}} \tag{101}$$

Здесь М – масса ионов в объеме элементарной ячейки $V_{\Im \Re}$, n_a – число электронов проводимости на единице объема, a – постоянная элементарной ячейки, k_0 – постоянная Больцмана, $u_{\Im G}$ – скорость звука и u_F – скорость Ферми, θ – характеристическая температура Дебая (в К).

Заканчивая анализ наиболее достоверных теоретически экспериментально выражений по «прямой» оценке удельного электросопротивления, приведем максимально «экспериментальное» приближенно справедливое соотношение для свободного электронного газа в любом металле с известным значением его температуры плавления $T_{n\pi}$

$$\rho \approx \frac{mu_F}{50\ell ne^2 T_{n\pi}} T$$
(102)

Здесь l – некоторая длина, проходимая электроном проводимости в металле в процессе измерения его ρ , которая определяется так, что l^3 приблизительно равна объему элементарной ячейки; в подобном физическом представлении параметра l предполагается, что реальная длина пробега электрона при температуре T_{nx} металла ориентировочно составляет 50 l $(\ell \approx \sqrt[3]{V_{3\pi}})$.

5.3 Расчетно-практическая «прямая» оценка электропроводности

Основополагающим базовым выражением для электропроводности металлов в предположении их изотропности для любого направления является

$$\sigma = \frac{ne^2}{m} \tau$$
, либо $\sigma = \frac{ne^2\ell}{mu_F}$.

При оценке *о* в металлических кристаллах принято опираться на ряд следующих положений:

– время релаксации τ , как время между столкновениями электрона с фононами («рассеивающие центры»), следует относить лишь к тем электронам, которые обладают энергией, близкой к энергии Ферми. Для подобных электронов в качестве времени релаксации берется величина $\tau = \frac{(r_s/a_0)^2}{\rho} \cdot 2.2 \cdot 10^{-15} c$, а во втором случае $\ell = \frac{(r_s/a_0)^2}{\rho} \cdot 92 \overset{0}{A}$ и $u_F = \frac{\hbar}{m} (3\pi^2 n)^{1/3} = \frac{4.2}{r_s / a_0} 10^8 cm / c$. Данные по u_F позволяют рассчитать $\ell = u_F \cdot \tau$ с оценкой τ , применяя выражение (30), т.е. $\tau = \frac{\sigma m}{ne^2}$;

– т.к. рассеяние электронов осуществляется фононами, то очевидно, что длина свободного пробега электронов должна быть обратно пропорциональна концентрации фононов, в частности, для высоких температур ($T > \theta$) $l_F \sim T^{-1}$ при низких ($T < \theta$) $l_F \sim [exp(-\theta/T)]^{-1}$;

– под *n* понимается полное число валентных электронов в единице объема кристаллического вещества. Если *n* – это число тех электронов, которые вносят вклад в проводимость, и которые располагаются у поверхности Ферми, то, в первом приближении, $n = Z/a^3$.

В литературе приводятся либо окончательные выражения для оценки σ , либо предполагаются предварительно рассчитанные выражения для τ или для l (и их дальнейшего использования в базовой формуле электропроводности). Отдельно, кроме того, анализируются формулы для оценки удельной электропроводности металла с вырожденным электронным газом и учетом простой и сложной поверхностей Ферми S_F , а также формула, включающая упругие характеристики металла.

Ниже приведены формулы для «прямой» оценки σ металлов, условно разделенные на три (I - III) группы.

I группа. К ней отнесены три формулы, полученные в предположении, что величина рассеяния электронов определяется квадратом амплитуды колебаний узлов кристаллической решетки. При этом четко предполагается, что на атом приходится один электрон проводимости. А это однозначно свидетельствует, что формулы первой группы справедливо только для одновалентных металлов:

$$\sigma = \frac{\mathrm{M}e^2\kappa_0}{2p_3^3 Q_s} \frac{\theta^2}{\mathrm{T}}, \ (\mathbf{T} > \boldsymbol{\theta})$$
(103)

$$\sigma = \frac{Me^2 u\kappa_0}{m\hbar^2_F} \frac{\theta^2}{T}, (T > \theta)$$
(104)

$$\sigma = \frac{\mathrm{M}e^2 \kappa_0 \theta}{m\hbar^2 u_F exp \langle \langle \theta / T \rangle}, (T < \theta)$$
(105)

во всех трех выражениях M – масса ионов в $V_{\Im \Re}$; e – заряд электрона; κ_0 – постоянная Больцмана; $p_{\Im} = \hbar/a$ – импульс электрона; $Q_s \approx d^2$ – среднее значение поперечного сечения иона при условии, что d – расстояние между ближайшими соседями в решетке.

II группа. В нее выделена формула электропроводности σ_F , позволяющая применять ее к металлам, электронный газ которых являясь вырожденным, при T = 0 заполняет в импульсном р – пространстве ферми–сферу с радиусом P_F и площадью сферы, равной $S_F = 4\pi P_F^2$, входящую в расчетную формулу для σ_F .

В общем окончательном варианте расчетной формуле для σ_F придается вид:

$$\sigma_F = \frac{2e^2}{3h^3} S_F \ell \tag{106}$$

отражающий факт, что все электроны металла находятся внутри фермиповерхности, а доминирующую основную роль в процессе электропроводности в металлах играют электроны с энергией, равной фермиевской.

Использование в практическом плане выражения (106) для электропроводности металла σ_F , электронный газ которого вырожден, а в электропроводности принимают участие электроны с энергией $\varepsilon \approx \varepsilon_F$ (электроны с энергией, меньше энергии Ферми не могут ускоряться электрическим полем), принято представлять в двух вариантах с учетом формы поверхности: просто обычная сферическая поверхность и сложная поверхность S_F произвольной формы. В обоих случаях общая запись выражения для поверхности имеет один и тот же общий вид: $S_F = 4\pi P_F^2$. Если в последнем P_F определяется выражением (91), то S_F выражается через число электронов в единице объема:

$$S_F = \left(\frac{3n}{8\pi}\right)^{2/3} h^2 \tag{107}$$

подстановка которого в (106) придает σ_F выражение:

$$\sigma_F = \frac{2e^2}{3h} \left(\frac{3n}{8\pi}\right)^{2/3} \ell \tag{108}$$

используемое в случае одновалентных кубических кристаллов-металлов.

В случае двухвалентных кубических и некубических металлов принято под P_F в формуле $S = 4\pi P_F^2$ понимать значение фермиевского импульса – радиуса ферми поверхности выражение (94), позволяющего получить выражение электропроводности σ_F металла со сложной поверхностью:

$$\sigma_F = \frac{8.4e^2h}{a} \left(\frac{3Z}{8\pi}\right)^{2/3} \ell \tag{109}$$

III группа – представлена выражением электропроводности металлов

$$\sigma = \frac{e^2 E a}{m u \, \pi k_0 T} \tag{110}$$

где E – модуль упругости; a – параметр решетки; u – скорость электрона, обладающего энергией Ферми ε_F .

Интересно отметить, что если при своем движении в металле средняя длина свободного пробега электрона ℓ_3 , движущегося в единице объема с числом *n* атомов кристаллической решетки в $1cm^3$, то

$$\ell_{\mathfrak{s}} = \frac{\mathrm{E}a}{\pi n k_0 \mathrm{T}} \tag{111}$$

5.4 Определение металлов с учетом предварительной независимой оценки времени релаксации электрона

В качестве базовой формулы расчета электропроводности металлов, основанной на квантовой статистике Ферми-Дирака, принято выражение, полученное Зоммерфельдом

$$\sigma = \frac{ne^2 \ell \langle \boldsymbol{\xi}_F \rangle}{mu \langle \boldsymbol{\xi}_F \rangle} \mathbf{w}_{\text{MM}} \sigma = \frac{ne^2}{m} \tau \langle \boldsymbol{\xi}_F \rangle$$
(112)

в котором $\ell(\varepsilon_F)$ – средняя длина свободного пробега электрона, проходящего это расстояние за время релаксации $\tau(\varepsilon_F)$, обладая при своем движении скоростью Ферми u_F . Несмотря на то, что данные соотношения по внешнему виду совпадают с классическими аналогами (20) и (112), содержание этих формул различно. В частности, в (20) u определяет среднюю скорость теплового движения электронов, пропорциональную \sqrt{T} , в то время как в формуле Зоммерфельда u_F практически не зависит от T, поскольку с изменением температуры ε_F остается практически неизменной (см. выражение (112)).

Ниже приведены расчетные формулы по *l*, *τ* для электронов проводимости в металлах, полученные в предположении рассеяния электронов

на фононах и «протекания» скорости релаксации по импульсу, характеризуя тем самым реальную электропроводимость σ .

Если в конкретных металлах в явлениях переноса заряда практически участвуют только электроны с энергией, близкой к энергии Ферми ε_F , и которым соответствуют волновой вектор

$$k = k(\varepsilon_F) = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m^* \varepsilon_F}$$
(113)

приблизительно равный (по порядку величины) 10⁸см, то длина свободного пробега электронов проводимости для металлов

$$\ell = \frac{4}{\pi^3} \frac{V_{\mathfrak{H}} M \kappa_0 \theta}{\hbar^2 C^2} (\frac{\theta}{\mathrm{T}}) E_{\mathfrak{H}}^2$$
(114)

время релаксации электронов проводимости для металлов

$$\tau = \frac{2.8}{\pi^3} \frac{V_{\Im \Re} M k_0 (m^*)^{1/2}}{\hbar^2 C^2} \left(\frac{\theta}{T}\right) E_{\Im^{3/2}}$$
(115)

при условии, что энергия электрона проводимости

$$E_{\mathcal{P}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \approx \varepsilon_F \,. \tag{116}$$

Если учесть, что длина волны фонона и длина волны электрона в металле – величины одного порядка ($l_{\phi} \approx l_{3}$), то это приведет к исчезновению в выражении для времени релаксации (112) одного значения θ .

При условии, что при выполнении относительного равенства длин свободных пробегов электрона проводимости в атомном полупроводнике и металле $l\phi \approx l = l$ будет составлять

$$\ell \approx \frac{\mathrm{M}u^2_{36}}{\kappa_0 T} a \tag{117}$$

т.е. *l* в металле больше постоянной решетки $a = (V_{39})^{1/3}$.

Во всех выражениях, содержащих температуру Дебая,

$$\theta = \frac{\hbar\omega_D}{k_0} = \frac{\hbar u_{3e} k_D}{k_0}, \qquad (118)$$

где k_D – максимальное значение волнового вектора акустического фонона

$$k_D = (6\pi / V_{_{3\pi}})^{1/3}$$

а скорость u_{36} для любых твердых тел определяется из равенства

$$\frac{1}{u_{36}^3} = \frac{1}{3} \left(\frac{1}{u_\ell^3} + \frac{2}{u_t^3} \right)$$
(119)

Здесь u_{6} и u_{t} скорости продольных и поперечных волн, причем u_{36} , определяемая условием (119), есть скорость звука, усредненная по направлениям и типам колебаний. В случае же только металлов для оценки u_{36} может использоваться соотношение

$$\mathbf{u}_{3\mathrm{B}} \equiv \sqrt{mZ/M} u_F \tag{120}$$

5.5 Эффективная масса электрона и ее учет при измерении параметров электропроводности и электросопротивления металлов

Во всех вышеприведенных расчетах в качестве массы электрона рассматривалась и бралась просто масса *m* совершенно свободного электрона. При этом учитывалось, что в процессах переноса участвует свободный электрон, обладающий массой $m = 9,1 \ 10^{-28}$ г и зарядом e^- (e) = 4,8 10^{-10} СГС. Если поместить его в электрическое поле с напряженностью E, то поле действует на электрон с силой $F = e^-E$, благодаря чему он приобретает ускорение а и энергию движения $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{P^2}{2m}$, где k – волновое число, связанное с импульсом носителя соотношением: $k = P/\hbar$.

Если же теперь рассматривать движение электрона, находящегося в периодическом поле кристалла благодаря внешней силе *F*, действующей на него со стороны внешнего поля *E*, то результирующее движение электронов в кристалле является более сложным, т.к. на них дополнительно действуют внутренние силы, создаваемые полем кристаллической ионной решетки. Отсюда следует, что уравнение движения электрона не будет иметь простого вида типа a = F/m, а будет осуществляться с групповой скоростью $u_{ep} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk}$ ($\omega = E/\hbar$). Дифференцируя u_{ep} по времени, получим:

$$a_{zp} = \frac{du_{zp}}{dt} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 \mathbf{E}}{dk^2} \frac{dk}{dt}$$
(121)

Принимая во внимание тот факт, что в кристалле внешняя сила, действующая на электрон, $F = \hbar \frac{dx}{dt}$, то подставляя величину $\frac{dx}{dt} = \frac{F}{\hbar}$ в выражение (121) будем иметь:

$$a_{zp} = \frac{du_{zp}}{dt} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 \mathbf{E}}{dk^2} \cdot F$$
(122)

ИЛИ

$$F = \frac{du_{zp}}{dt} \frac{\hbar^2}{(d^2 E/dk^2)}$$
(123)

Запись (123) выражает второй закон Ньютона, из которой следует, что под действием внешней силы (F) электрон в периодическом (кристаллическом) поле решетки двигается в среднем так, как двигался бы под действием этой F свободный электрон, если бы он обладал массой

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\left(\frac{d^2 E}{dk^2}\right)}$$
(124)

получившей название эффективной массы электрона.

Эффективная масса электрона в любом материале не определяет ни m *гравитационных, инерционных свойств. Введение ΗИ его учитывать сложный характер взаимодействия дает возможность С кристаллической решеткой при его движении под действием внешнего электрического поля E и одновременно принимать во внимание, что величина *т* * зависит от направления движения электрона, его состояния и анизотропии кристалла: при движении электрона взаимодействия силы его С кристаллической решеткой неодинаковы в различных кристаллографических направлениях. В свою очередь, различие m m *между И обусловлено взаимодействием электрона с решеткой: электрон проводимости взаимодействует с периодическим потенциалом решетки, приводя к изменению

ее импульса, которое вызывается только изменением состояния электрона. В частности, такому электрону необходимо приписать другое значение массы, зависящее от природы рассматриваемого материала или от типа (вида) ионной решетки. Последние объеме кристаллической создают В материала электрические поля, получившие название кристаллических полей, причем тип между определяют силу ИОНОВ И расстояние НИМИ (напряженность) кристаллического поля. Поэтому понятно, что кристаллические поля обладают вполне определенными значениями для каждого данного материала, а тем самым между ними и электронами реализуются различные по величине «электрические» взаимодействия, напрямую приводящие к неодинаковым по эффективным массам электронов численным значениям проводимости, которые могут быть больше или меньше *т* электронов в их свободном состоянии.

Из вышеизложенного непосредственно следует, что эффективная масса электрона является свойством вещества, и, следовательно, рассмотренные соотношения, содержащие величину m, следует просто переписать, используя m^* . Так наиболее важные выражения принимают вид:

1) для энергии Ферми –
$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{3n}{\pi}\right)^{\frac{2}{3}} = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m^*};$$

2) скорости Ферми – $u_F = \left(\frac{2\varepsilon_F}{m}\right)^{\frac{1}{2}};$

3) подвижности –
$$\mu = \frac{e}{m^*} \tau = \frac{e\ell}{m^* u}$$

где *l* определяется с помощью формулы $\ell = \overline{u} \cdot \tau$, а средняя тепловая скорость $\overline{u} \approx (\varepsilon_F / m *)^{1/2}$;

4)электропроводности –
$$\sigma = \frac{ne^2}{m^*}\tau = \frac{ne^2l}{m^*u};$$

5) время релаксации – $\tau_{\sigma} = \frac{\sigma m^*}{ne^2}; \tau_{\rho} = \frac{m^*}{\rho ne^2};$

6) электросопротивления – $\rho = \frac{1}{\sigma}$.

В заключении следует обратить внимание на тот факт, что введение понятия m^* электрона служит удобным способом описания движения электрона по действием внешней F при его нахождении в периодическом кристаллическом поле кристалла.

Сама же m^* не является массой в обычном смысле этого слова, поскольку, как уже отмечалось, m^* электрона не определяет ни его инерционных и гравитационных свойств, а также не определяет запаса энергии. По величине она может быть больше или меньше истинной массы *m* электрона; в свою очередь m^* выступает или является коэффициентом пропорциональности в выражении, связывающем внешнюю силу *F* с ускорением движения электрона $a_{z_p} = du_{zp}/dt$.

Вполне понятно, что для конкретизации численных результатов по электропроводности и электросопротивлению металлов и сопоставления их экспериментальными данными необходим параллельный анализ полученных данных по σ (и $\rho = \frac{1}{\sigma}$), рассчитанных с использованием просто *m* электронов и их эффективных значений m^* . Отсюда следует важность значения величины m^* электронов, двигающихся под действием внешней силы в кристаллических полях разноионных решеток металлов.

Судя по литературным источникам наиболее точные значения m^* могут быть получены при использовании формулы:

$$m^* = m \frac{1}{1 + 0.22(r_S / a_0)} \tag{125}$$

где величины r_s/a_0 приведены в таблице 5.

Наряду с расчетом m* по (125) эффективная масса может быть оценена с помощью выражения

$$m^* = \frac{\hbar^2}{2\gamma a^2}, \qquad (126)$$

где *а* – расстояние между ближайшими ионами решетки, **ү** – удельная теплоемкость.

Рассчитанные значения m* по литературным данным приведены в таблице 8.

Таблица 8 – Значения отношения эффективной массы m* к массе свободного электрона в разных металлах.

Металл	m* / m	Металл	m* / m
Li	2,4	Nb	1,2
Na	1,26	Fe	12
K	1,1	Mn	27
Rb	1,26	Zn	0,9
Cs	1,43	Cd	0,8
Cu	1,5	Al	1,6
Ag	1,0	Ga	0,4
Au	1,14	In	1,37
Be	0,46	T1	1,14
Mg	1,3	Sn	1,2
Ca	0,8	Pb	2,1
Ba	1,4	Sb	0,38
Ni	28	Со	14

Контрольные вопросы

1. Правило Маттисена.

2. Температурная зависимость удельного электросопротивления при низких и высоких температурах.

3. Основополагающее выражение для электропроводности металлов.

4. Групповая скорость электрона в периодическом поле кристаллической решетки.

5. Эффективная масса электрона.

Список использованных источников

1. Арзамасов Б.В. Материаловедение: учебник для вузов / Б. В. Арзамасов, В.И.Макарова, Г.Г.Мухин [и др.]. – М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2008. – 655с.

 Батаев В.А. Методы структурного анализа материалов и контроля качества деталей : Учебное пособие / В.А. Батаев, А.А. Батаев, А.П. Алхимов. – 2-е изд. – М.: Флинта : Наука, 2007. – 224 с.

 Беляков В.А. Электромагнетизм. Твердое тело [Текст] / В.А Беляков и др. – М.: Просвещение, 1982. – 144 с.

4. Блекмор Дж. Физика твердого тела [Текст] / Дж.Блекмор. – М.: Мир, 1988.

Викулин И.Р., Стафеев В.И. Физика полупроводниковых приборов.
 – 2-е изд., перераб. и доп. – М.: Радио и связь, 1990 г. – 264 с.

6. Горбачев В.В. Физика проводников и металлов [Текст] / В.В Горбачев., Л.Г Спицвена. – М.: Металлургия, 1982.

7. Гроссе П. Свободные электроны в твердых телах [Текст] / П.Гроссе. – М.: Мир, 1982.

8. Джаманбалин К.К. Электротехнические материалы: учебник для студентов, обучающихся в высших учебных заведениях на инженерных специальностях / К.К.Джаманбалин, О.В.Тарабаева. – Костанай, 2005. – 127 с.

9. Dobrzański L. A. Significance of materials science for the future development of societies / L. A. Dobrzański // Journal of Materials Processing Technology. – 2006. – Vol. 175. – No. 1–3. – P. 133–148.

10. Журавлев Л.В. Электроматериаловедение: учебное пособие для сред. проф. образования / Л.В.Журавлев. – М.: Академия, 2004. – 312 с.

11. Казанцев А.П. Электротехнические материалы: учебное пособие для ПТУ/ А.П.Казанцев. – Минск: Дизайн ПРО, 2007. – 96 с.

12. Лысаков В.С. О корректировке омического сопротивления элементов электрооборудования в автотранспорте [Текст] // Материалы Всероссийской

научно-практической конференции // Оренбург: РИК ГОУ ОГУ, с.297 – 300, 2005.

13. Никулин Н.В. Электроматериаловедение: учебник для ПТУ / Н.В.Никулин. – 3-е изд., испр. и доп. – М.: Высшая. шк., 1989. – 192 с.

14. Плохов А. В., Попелюх А. И., Веселов С. В., Тюрин А. Г., Никулина
А. А. Исследование конструктивной прочности материалов после комбинированного упрочнения и специальных видов сварки. – Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2015. – 392 с.

15. Пасынков В.В., Сорокин В.С. Материалы электронной техники, СПб.: Изд-во «Лань», 2002. – 368 с.

16. Суриков В.С. Основы электродинамики. – М.: Протон. – 2000.

17. Тушинский Л.И. Структурная теория конструктивной прочности материалов. – Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2004. – 400 с.

 Шалимова К.В. Физика полупроводников: Учебник. – СПб: Изд-во «Лань», 2010. – 392 с.

Глоссарий

Анизотропность – это способность кристалла проявлять различные свойства в разных направлениях. Поскольку различные направления в кристаллической структуре вещества, построенного по закону трехмерной периодичности, могут иметь неодинаковые расстояния между атомами, то и свойства по таким направлениям могут быть различными.

Валентная зона — энергетическая область разрешённых электронных состояний в твёрдом теле, заполненная валентными электронами.

Время релаксации – период времени, за который амплитудное значение возмущения в выведенной из равновесия физической системе уменьшается в е раз (e-2,72).

Групповая скорость – это величина, характеризующая скорость «группы то более ИЛИ распространения волн», есть менее хорошо локализованной квазимонохроматической волны (волны с достаточно узким спектром).

Длина свободного пробега молекулы – это среднее расстояние, которое пролетает частица за время между двумя последовательными столкновениями.

Дрейфовая скорость – средняя скорость движения частиц, например, электронов, приобретаемая в результате воздействия электрического поля.

Запрещённая область значений зона энергии, которыми не может обладать электрон в идеальном (бездефектном) кристалле. Ширина запрещённой зоны – это ширина энергетического зазора между дном зоны валентной 30ны, проводимости И потолком В котором отсутствуют разрешённые состояния для электрона.

Зона проводимости – в зонной теории твёрдого тела первая из незаполненных электронами зон в полупроводниках и диэлектриках. Электроны из валентной зоны, преодолев запрещённую зону, при ненулевой

температуре попадают в зону проводимости и начинают участвовать в проводимости, то есть перемещаться под действием электрического поля.

Изотропность – одинаковость свойств пространства по всем направлениям, то есть поворот любой замкнутой физической системы как целого не изменяет её физические свойства.

Кристаллическая решетка – вспомогательный геометрический образ, вводимый для анализа строения кристалла.

Монокристалл – отдельный однородный кристалл, имеющий во всём объёме единую кристаллическую решётку.

Напряженность – векторная физическая величина, характеризующая электрическое поле в данной точке и численно равная отношению силы. действующей на неподвижный точечный заряд, помещенный в данную точку поля, к величине этого заряда.

Пространственная решётка – трёхмерная периодическая система точек (узлов), расположенных на вершинах одинаковых параллелепипедов, которые вплотную примыкают друг к другу целыми гранями и заполняют пространство без промежутков.

Симметрия – равномерное расположение по отношению к некой центральной точке или оси симметрии, например, частей геометрической фигуры, элементов формы какого-нибудь искусственного предмета.

Сингония – одно из подразделений кристаллов по признаку формы их элементарной ячейки. Сингония включает группу классов симметрии, обладающих одним общим или характерным элементом симметрии при одинаковом числе единичных направлений.

Твёрдое тело – одно из четырёх основных агрегатных состояний вещества, отличающееся от других агрегатных состояний (жидкости, газов, плазмы) стабильностью формы и характером теплового движения атомов, совершающих малые колебания около положений равновесия.

Температура–физическаявеличина,характеризующая термодинамическуюсистему иколичественновыражающая интуитивное понятие о различной степени нагретости тел.

Теплопроводность – способность материальных тел проводить энергию (теплоту) от более нагретых частей тела к менее нагретым частям тела путём хаотического движения частиц тела.

Удельной электропроводностью называют меру способности вещества проводить электрический ток.

Удельное сопротивление — это физическая величина, которая определяет сопротивление проводника из данного вещества длиной 1 м и площадью поперечного сечения 1 м².

Ферми-газ – газ, который состоит из фермионов – частиц с полуцелым спином, имеющих малую массу и высокую концентрацию, подчиняющихся статистике Ферми-Дирака. Вещество в данном состоянии проявляет квантовомеханические эффекты.

Фонон – квазичастица, представляющая собой квант колебательного движения атомов кристалла.

Электрический ток – упорядоченное (направленное) движение электрических зарядов.

Электронный газ – теоретическая модель, описывающая поведение В модели электронного газа пренебрегают электронов проводимости. кулоновским взаимодействием Оправданием между электронами. пренебрежения кулоновским взаимодействием служит, во-первых, существование ионов кристаллической решётки, электростатический заряд компенсирует заряд электронов, которых В среднем a, во-вторых, экранирование существенно уменьшающее радиус действия зарядов, кулоновских сил.

Электрическое сопротивление – физическая величина, характеризующая свойство проводника препятствовать

прохождению электрического тока и равная отношению напряжения на концах проводника к силе тока, протекающего по нему.

Электропрово́дность – способность тела (среды) проводить электрический ток, свойство тела или среды, определяющее возникновение в них электрического тока под воздействием электрического поля.

Энергия Фе́рми – это увеличение энергии основного состояния системы при добавлении одной частицы.

Эффективная масса – величина, имеющая размерность массы и применяемая для удобного описания движения частицы в периодическом потенциале кристалла.