

F6122 Základy fyziky pevných látek – seminář
elektrony v pevné látce
včetně řešení, verze 16. března 2020

1	Drudeho model volných elektronů	1
1.1	Mathiessenovo pravidlo	1
1.2	Frekvenční závislost vodivosti volných elektronů v kovu v Drudeho modelu	1
1.3	Optická odezva zlata v IR a VIS	2
2	Sommerfeldův model volných elektronů	3
2.1	Betheho–Sommerfeldův rozvoj	3
2.2	Tepelná kapacita v Sommerfeldově modelu za nízkých teplot	4
2.3	Tepelná vodivost elektronového plynu	4

1 Drudeho model volných elektronů

1.1 Mathiessenovo pravidlo

Mějme kovový materiál, kde elektrony se mohou rozptylovat na příměsích s teplotně nezávislou relaxační dobou τ_p a také na tepelných kmitech mříže s relaxační dobou $\tau_t(T)$. Předpokládejme, že oba druhy rozptylu jsou vzájemně nezávislé. Jaká bude celková relaxační doba, teplotní závislost měrného elektrického odporu a měrné vodivosti?

Řešení Pravděpodobnosti rozptylu jsou nezávislé, tudíž je pravděpodobnost rozptylu za jednotku času rovna součtu poravděpodobností. Pravděpodobnost za čas dt je

$$P(dt) = \frac{dt}{\tau} = \frac{dt}{\tau_p} + \frac{dt}{\tau_t(T)}.$$

Odtud $\sigma = \frac{ne^2\tau}{m_e}$

$$\rho = \rho_d + \rho_t(T) = \frac{m_e}{ne^2} \left(\frac{1}{\tau_p} + \frac{1}{\tau_t(T)} \right).$$

1.2 Frekvenční závislost vodivosti volných elektronů v kovu v Drudeho modelu

V Drudeho modelu je pohyb elektronů popsán rovnicí

$$\frac{dv}{dt} + \frac{v}{\tau} = \frac{F}{m} = \frac{1}{m} \Re[-eEe^{-i\omega t}].$$

Najděte frekvenční závislost vodivosti.

Řešení

$$j = -nev = \sigma E,$$

$$v(t) = v_0 e^{-i\omega t},$$

$$v_0(\omega) = -\frac{e\tau}{m} \frac{1}{1 - i\omega\tau} E,$$

$$\sigma(\omega) = -nev_0/E = \frac{\sigma_0}{1 - i\omega\tau} = \frac{\sigma_0}{1 + \omega^2\tau^2} + i \frac{\sigma_0\omega\tau}{1 + \omega^2\tau^2},$$

kde $\sigma_0 = \frac{Ne^2\tau}{m}$.

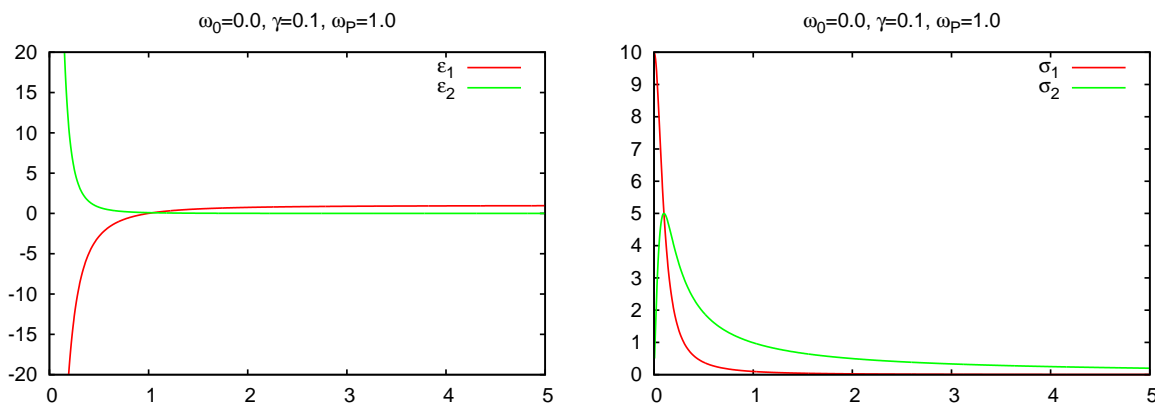
Alternativně: Řešení je podobné Lorentzovu modelu, s tím, že $\omega_0 = 0$.

$$\epsilon(\omega) = 1 - \frac{Ne^2}{\epsilon_0 m} \frac{1}{\omega^2 + i\omega/\tau} = 1 - \frac{Ne^2\tau}{\epsilon_0 m} \frac{1}{\omega(i + \omega\tau)} = 1 - \frac{\omega_p^2\tau}{\omega(i + \omega\tau)} = 1 - \frac{\sigma_0}{\epsilon_0\omega} \frac{1}{i + \omega\tau},$$

$$\epsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2\tau^2}{1 + \omega^2\tau^2} + i \frac{\omega_p^2\tau/\omega}{1 + \omega^2\tau^2} = 1 - \frac{\sigma_0}{\epsilon_0} \frac{\tau}{1 + \omega^2\tau^2} + i \frac{\sigma_0}{\epsilon_0\omega} \frac{1}{1 + \omega^2\tau^2},$$

kde $\sigma_0 = \frac{Ne^2\tau}{m} = \epsilon_0\omega_p^2\tau$ je statická vodivost v Drudeho modelu. Pro komplexní vodivost dostaneme

$$\sigma(\omega) = -i\omega\epsilon_0(\epsilon(\omega) - 1) = \frac{\sigma_0}{1 - i\omega\tau} = \frac{\sigma_0}{1 + \omega^2\tau^2} + i \frac{\sigma_0\omega\tau}{1 + \omega^2\tau^2}.$$



Poznámky: $\epsilon_1(\omega_L) = 0$, $\omega_L = \sqrt{\omega_p^2 - 1/\tau^2} \approx \omega_p$. $\sigma(0) = \sigma_0$. $\sigma_1(1/\tau) = \sigma_2(1/\tau) = \sigma_0/2$.

1.3 Optická odezva zlata v IR a VIS

Optická odezva zlata v IR a VIS oblasti se dá popsat Drudeho formulí

$$\varepsilon(E) = \varepsilon_\infty - \frac{E_P^2}{E(E + i\Gamma)} \quad [\text{eV}],$$

kde $\varepsilon_\infty = 3$, $E_P^2 = 57.2 \text{ eV}^2$ a $\Gamma = 0.0602 \text{ eV}$. Spočítejte reálnou část vodivosti, index lomu a hloubku průniku pro energie fotonu $\hbar\omega = 0.001, 0.01, 0.1, 1, 2$ a 3 eV .

Řešení $E_P = 7.56 \text{ eV}$, $\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty - \frac{\omega_P^2 \tau^2}{1 + \omega^2 \tau^2} + i \frac{\omega_P^2 \tau / \omega}{1 + \omega^2 \tau^2}$.

$$\sigma_1(\omega) = \frac{\sigma_0}{1 + \omega^2 \tau^2}, \quad \omega\tau = \hbar\omega / \Gamma, \quad \sigma_0 = \omega_P^2 \tau \varepsilon_0 \text{ a tedy } \sigma_0 = \varepsilon_0 E_P^2 / \hbar\Gamma = 12.786 \cdot 10^6 \Omega^{-1} \text{m}^{-1}.$$

$$N = \sqrt{\frac{\sqrt{\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2} + \varepsilon_1}{2}}, \quad K = \sqrt{\frac{\sqrt{\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2} - \varepsilon_1}{2}}, \quad d = \frac{\lambda_{\text{vac}}}{4\pi K}.$$

$\hbar\omega$ (eV)	λ (μm)	ε_1	ε_2	σ_1 ($10^6 \Omega^{-1} \text{m}^{-1}$)	N	K	d (μm)	R
0.001	1239.8	-15776	949904	12.78	683	694	0.142	0.997
0.01	123.98	-15356	92465	12.44	198	233	0.042	0.992
0.1	12.398	-4195	2527	3.401	18	67	0.0146	0.985
1.0	1.2398	-54	3.4	0.046	0.23	7.4	0.0134	0.983
2.0	0.6199	-11.3	0.43	0.0116	0.064	3.36	0.0147	0.979
3.0	0.4133	-3.35	0.127	0.0051	0.035	1.83	0.0179	0.968

2 Sommerfeldův model volných elektronů

2.1 Betheho–Sommerfeldův rozvoj

Ukažte, že integrál $\int_0^\infty H(E) f_{FD}(E) dE$ je možné aproximovat rozvojem

$$\int_0^\infty H(E) f_{FD}(E) dE = \int_0^\mu H(E) dE + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 H'(\mu) + \frac{7\pi^4}{360} (k_B T)^4 H'''(\mu) + \mathcal{O} \left[\left(\frac{k_B T}{\mu} \right)^6 \right].$$

Pomůcka:

$$\int_0^\infty dx \frac{x}{e^x + 1} = \frac{\pi^2}{12}$$

Řešení Máme nalézt rozvoj integrálu

$$I = \int_0^\infty H(E) f_{FD}(E) dE, \quad f_{FD}(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{k_B T}} + 1}.$$

Prvním krokem bude úprava s využitím skokové funkce $f_0(E) = \theta(\mu - E)$, která nabývá hodnoty 1 pro $E < \mu$ a 0 pro $E > \mu$:

$$I = \int_0^\mu H(E) dE + \int_0^\infty H(E) [f_{FD}(E) - f_0(E)] dE.$$

První integrál lze obvykle snadno spočítat, v druhém se vyskytuje funkce $f_{FD}(E) - f_0(E)$, která má vyjádření

$$f_{FD}(E) - f_0(E) = \frac{1}{e^{\frac{|E-\mu|}{k_B T}} + 1} \operatorname{sgn}(E - \mu)$$

a následující příznivé vlastnosti: je nezanedbatelná jen v malém okolí chemického potenciálu μ (několik $k_B T$) a je lichá vůči μ . Rozvíňme funkci $H(E)$ v okolí $E = \mu$ do Taylorovy řady

$$H(E) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left. \frac{d^n H}{dE^n} \right|_{\mu} (E - \mu)^n.$$

Je-li funkce $H(E)$ dostatečně hladká v okolí $E = \mu$, budou koeficienty v této řadě rychle klesat s n a postačí tak vzít jen několik prvních členů. Po dosazení a prodloužení integračního oboru na $(-\infty, +\infty)$, které způsobí zanedbatelnou chybu ($k_B T \ll \mu$), dostaneme

$$I = \int_0^\mu H(E) dE + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left. \frac{d^n H}{dE^n} \right|_{\mu} \int_{-\infty}^{\infty} (E - \mu)^n [f_{FD}(E) - f_0(E)] dE$$

Členy se sudým n vypadnou, protože integrujeme lichou funkci $f_{FD}(E) - f_0(E)$ se sudou funkcí $(E - \mu)^n$ na symetrickém intervalu. Ve zbývajících členech zavedeme substituci

$$x = \frac{E - \mu}{k_B T}$$

a využijeme sudosti integrandů

$$I = \int_0^\mu H(E) dE + \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{(2j+1)!} \left. \frac{d^{2j+1} H}{dE^{2j+1}} \right|_{\mu} (k_B T)^{2j+2} 2 \int_0^\infty \frac{x^{2j+1}}{e^x + 1} dx.$$

Omezíme-li se pouze na první dva opravné členy, máme

$$\begin{aligned} I &\approx \int_0^\mu H(E) dE + (k_B T)^2 H'(\mu) 2 \int_0^\infty \frac{x}{e^x + 1} dx + (k_B T)^4 H'''(\mu) \frac{1}{3} \int_0^\infty \frac{x^3}{e^x + 1} dx \\ &= \int_0^\mu H(E) dE + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 H'(\mu) + \frac{7\pi^4}{360} (k_B T)^4 H'''(\mu). \end{aligned}$$

2.2 Tepelná kapacita v Sommerfeldově modelu za nízkých teplot

Experimentálně zjištěná tepelná kapacita kovů pro nízké teploty splňuje vztah

$$\frac{C_v}{V_{\text{mol}}} = \gamma T.$$

Vypočítejte koeficient γ následujících kovů a srovnajte s tabulkovou hodnotou.

	a [Å]	γ [mJ/mol.K]
Cu	3,61	0,695
Ag	4,09	0,646
Au	4,08	0,729

Předpokládejte jeden vodivostní elektron na atom. Všechny tyto kovy mají strukturu kubickou plošně centrovanou (fcc). Pomůcka: $\left(\frac{\pi}{12}\right)^{2/3} \frac{k^2 m N_A}{\hbar^2} = 3.848 \times 10^{15} \text{ Jmol}^{-1} \text{ K}^{-1} \text{ m}^{-2}$.

Řešení Tepelná kapacita na jednotku objemu elektronového plynu v Sommerfeldově modelu je rovna $c_V = \frac{\pi^2}{2} n k_B \frac{T}{E_F} = \frac{\pi^2}{2} n k_B^2 \frac{T}{E_F}$, za Fermiho energii dosadíme $E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m_e}$ a za Fermiho vlnový vektor $k_F = \sqrt[3]{3\pi^2 n}$, kde n je koncentrace elektronů $n = \frac{4}{a^3}$ pro kubickou plošně centrovanou mřížku a jeden volný elektron na atom. Tepelná kapacita na mol látky je rovna $c_V = \frac{\pi^2}{2} N_A k_B^2 \frac{T}{E_F}$. Dosazením dostaneme $c_V = \left(\frac{\pi}{12}\right)^{2/3} \frac{k^2 m N_A}{\hbar^2} a^2$ pro tepelnou kapacitu na jeden mol látky. Dosazením snadno porovnáte teoretické a experimentální hodnoty.

2.3 Tepelná vodivost elektronového plynu

Tok tepelné energie v materiálu, kde předpokládáme tepelný gradient ve směru osy z , je dán vztahem

$$j_E = \frac{1}{3} l \langle v \rangle \frac{du}{dz},$$

kde l je střední volná dráha, $\langle v \rangle$ střední driftová rychlost a u je hustota vnitřní energie. Gradient $\frac{du}{dz}$ můžeme napsat ve tvaru

$$\frac{du}{dz} = \frac{du}{dT} \frac{dT}{dz} = c_V \frac{dT}{dz},$$

kde c_V je tepelná kapacita elektronového plynu. Dosad'te do předchozích vztahů vztahy získané pro elektronový plyn a odvoďte Wiedemannův-Franzův zákon

$$\frac{\lambda}{\sigma T} = \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k}{e}\right)^2 = 2,45 \times 10^{-8} \text{ W}\Omega\text{K}^{-2}.$$

Výsledek porovnejte s tabulkovými hodnotami pro reálné kovy.

kov	L ($10^{-8} \text{ W}\Omega \cdot \text{deg}^{-2}$)		kov	L ($10^{-8} \text{ W}\Omega \cdot \text{deg}^{-2}$)	
	při 0°C	při 100°C		při 0°C	při 100°C
Ag	2.31	2.37	Pb	2.47	2.56
Au	2.35	2.40	Pt	2.51	2.60
Cd	2.42	2.43	Sn	2.52	2.49
Cu	2.23	2.33	W	3.04	3.20
Mo	2.61	2.79	Zn	2.31	2.33

Řešení $c_V = \frac{\pi^2}{2} n k_B \frac{T}{E_F} = \frac{\pi^2}{2} n k_B^2 \frac{T}{E_F} = \pi^2 \frac{n k_B^2 T}{m v_F^2}$, kde $E_F = 1/2 m v_F^2$.

$$\lambda = \frac{1}{3} C_v v l = \frac{\pi^2}{3} \frac{n k_B^2 T}{m v_F^2} v_F (v_F \tau) = \frac{\pi^2 n k_B^2 T \tau}{3 m}.$$

$$L = \frac{\lambda}{\sigma \tau} = \frac{\pi^2 n k_B^2 T \tau / 3 m}{n e^2 \tau / m} = \frac{\pi^2 k_B^2}{3 e^2}.$$