

ВРЕМЯ РЕЛАКСАЦИИ ЭЛЕКТРОНОВ ПРОВОДИМОСТИ В МЕТАЛЛЕ

А.Н. Пчелинцев, В.А. Шишин

Кафедра физики, ТГТУ

Представлена членом редколлегии профессором В.И. Коноваловым

Ключевые слова и фразы: вероятность упругого рассеяния; возмущение решетки; время релаксации.

Аннотация: Исследуется процесс рассеяния носителей заряда в металлах на продольных колебаниях кристаллической решетки. Приведен последовательный вывод выражения для времени релаксации электрона проводимости.

Удельная электропроводность

Обратную зависимость электропроводности σ металла от абсолютной температуры T используют в различных измерительных и автоматических устройствах. Наиболее важным из них является термометр сопротивления. Этот прибор обладает тем достоинством, что им можно пользоваться как при очень низких, так и при весьма высоких температурах, при которых применение обычных жидкостных термометров невозможно.

Однако, чтобы объяснить характер этой зависимости, необходимо вычислить время релаксации τ электрона проводимости, взаимодействующего, согласно теории Блоха, с неоднородностями кристаллической решетки проводника.

Рассмотрим прохождение постоянного тока через металл в отсутствие магнитного поля. Градиент температуры также отсутствует.

Запишем "обычное" выражение для электропроводности

$$\sigma = \frac{ne^2\bar{l}}{p_F},$$

где n – плотность электронов проводимости в металле; $\bar{l} = \bar{v}_F\tau$ – средняя длина свободного пробега электрона, имеющего скорость \bar{v}_F , с энергией порядка фермиевской; $p_F \approx \hbar/a$ – импульс, соответствующий уровню Ферми (a – межатомное расстояние).

Формула носит несколько формальный характер – взаимодействие электронов, приводящее к конечной величине сопротивления металла, "спрятано" во времени τ . Вычисление этой величины – одна из основных задач теории металлов. Достаточно полный обзор работ по этому вопросу можно найти, например, в книге Дж. Займана [1].

Хотя до настоящего времени задачу о вычислении τ нельзя считать полностью решенной, совершенно очевидно, что основные механизмы сопротивления металла нам известны: 1) столкновения электронов с фононами; 2) столкновения

электронов друг с другом и 3) столкновения электронов с примесными атомами и другими статическими дефектами кристаллической решетки проводника. Первые два механизма имеют место в идеальном кристалле и обуславливают так называемое идеальное сопротивление, которое обращается в нуль при 0 К; третий механизм характерен для дефектных кристаллов и является причиной остаточного сопротивления.

В данной статье рассматривается только первый механизм, ибо неоднородность ионной решетки, обусловленная колебаниями ионов относительно положений равновесия, служит наиболее важной причиной температурной зависимости электропроводности при комнатных температурах.

В логической последовательности покажем вывод выражения для $\tau(T)$.

Запишем решение Блоха кинетического уравнения Больцмана

$$\frac{1}{\tau} = \int_{\Omega} W(\theta)(1 - \cos \theta) d\Omega. \quad (1)$$

Здесь $W(\theta)d\Omega$ – вероятность упругого рассеяния за единицу времени электрона в телесный угол $d\Omega$; θ – угол между первоначальным направлением движения электрона и рассеянного электрона.

При выводе соотношения (1) предполагалось, что движение электрона подчиняется законам классической механики. Это выражение также справедливо, если энергия электрона

$$\varepsilon = \frac{\hbar k^2}{2m^*} = \frac{m^* v_F^2}{2},$$

где $\vec{v}_F = \frac{\hbar \vec{k}}{m^*}$; \vec{k} – волновой вектор электрона, характеризующий его квантовое

состояние; m^* – эффективная масса электрона в кристалле. Таким образом, движение электрона можно исследовать, пользуясь полуклассическим приближением. Следует подчеркнуть, что полуклассичность движения фермиевских электронов во внешних полях (не только в электрическом) связана с большой плотностью электронов ($n \approx 1/a^3$) и, как следствие из этого, с малостью длины волны де Бройля ($\lambda_B \approx a \approx 3 \cdot 10^{-10}$ м).

Тепловые колебания атомов решетки

Движение каждого атома кристаллической решетки вокруг своего положения равновесия можно представить в приближении в виде суперпозиции нескольких простых гармонических колебаний, каждое из которых со своей характеристической частотой ω_i . Физически это означает, что систему колеблющихся атомов кристалла можно моделировать в виде некоторого числа независимых гармонических осцилляторов. Колебания, когда атомы колеблются в одной фазе, называются акустическими.

Если рассмотреть тепловые колебания с позиций квантовой механики, то каждый осциллятор может изменить свою энергию лишь квантованно на величину $\Delta E_i = \hbar \omega_i \Delta n_i$. Как известно из квантовой механики, правило отбора для квантового числа осциллятора имеет вид $\Delta n_i = \pm 1$. Если $\Delta n_i = -1$, то решетка переходит на одно из более низких энергетических состояний, а энергия $\hbar \omega_i$ отдается

носителям заряда. Следовательно, квант $\hbar\omega_i$ является квантом энергии колебаний решетки. Такой квант получил название фонона. Переход $\Delta n_i = -1$ является процессом излучения фонона решеткой, а переход $\Delta n_i = +1$ – процессом поглощения фонона.

В работе рассматривается рассеяние электронов проводимости только на акустических фононах в простой кубической решетке.

Из квантовой механики известно, что равновесное значение энергии осциллятора имеет вид

$$\bar{E}_i = \frac{\hbar\omega_i}{2} + \frac{\hbar\omega_i}{e^{k_0T} - 1}, \quad (2)$$

где k_0 – постоянная Больцмана. Условие (2) вытекает из того, что фононы подчиняются статистике Бозе-Эйнштейна.

Если считать, что возбуждение осциллятора адекватно рождению фонона, то среднее число фононов определяется из (2)

$$\bar{n}_i = \frac{\bar{E}_i}{\hbar\omega_i} = \frac{1}{2} + \frac{1}{e^{k_0T} - 1}.$$

При $T \gg T_D$ (T_D – температура Дебая), когда $k_0T \gg \hbar\omega_i$, осциллятор находится в высоком энергетическом состоянии и

$$\bar{n}_i \approx \frac{k_0T}{\hbar\omega_i}.$$

Рассеяние носителей заряда на фононах

Рассеяние носителей заряда на тепловых колебаниях атомов кристаллической решетки теперь можно рассматривать как взаимодействие частиц: электрона с волновым вектором \vec{k} и фонона, состояние которого определяется волновым вектором \vec{q} .

Из законов сохранения следуют выражения

$$\begin{cases} \hbar\vec{k}' = \hbar\vec{k} \pm \hbar\vec{q}, \\ \frac{\hbar^2 k'^2}{2m^*} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \pm \hbar\omega_q. \end{cases} \quad (3)$$

Здесь $\omega_q = \omega_i(q) = v_0q$ (v_0 – скорость волн звука), верхний знак относится к случаю поглощения, а нижний – к случаю испускания фонона. Отсюда

$$q = \mp 2k \cos \zeta \pm \frac{2m^* v_0}{\hbar}, \quad (4)$$

где ζ – угол между направлениями векторов \vec{k} и \vec{q} .

Оценим порядок отношения второго слагаемого к первому в правой части выражения (4)

$$\frac{m^* v_0}{\hbar k} \approx \frac{m^* v_0 a}{\hbar} \ll 1,$$

где $m^* \approx 10^{-30}$ кг, $v_0 \approx 2 \cdot 10^3$ м/с; поэтому при любых температурах можно пренебречь вторым слагаемым, так что

$$q = \mp 2k \cos \zeta.$$

Тогда получаем, что носители заряда поглощают и испускают фононы с $q \approx k$. Очевидно, что пренебрежение вторым слагаемым в (4) равносильно пренебрежению энергией фонона в (3), т.е. неупругостью рассеяния электрона.

Таким образом, рассеяние удобно описывать изменением волнового вектора электрона. В этом случае можно применить аппарат теории квантовых переходов Дирака, основной задачей которой является вычисление вероятности $W(\theta) = W_{\vec{k}\vec{k}'}$ перехода электрона из одного квантового состояния в другое. В соответствии с этой теорией [2, с. 450 – 453]

$$W_{\vec{k}\vec{k}'} = \frac{2\pi}{\hbar} U^2 \delta(\varepsilon(\vec{k}') - \varepsilon(\vec{k}) \mp \hbar\omega_q),$$

где U – возмущение решетки; $\delta(x) = \begin{cases} 0 & \text{при } x \neq 0, \\ \infty & \text{при } x = 0 \end{cases}$ – дельта-функция Дирака, отражающая требование выполнения закона сохранения энергии при рассеянии. При упругом рассеянии δ – функция имеет вид

$$\delta\left(\pm \frac{\hbar^2 k q}{m^*} \cos \zeta + \frac{\hbar^2 q^2}{2m^*}\right) = \frac{m^*}{\hbar^2 k q} \delta\left(\frac{q}{2k} \pm \cos \zeta\right),$$

где мы воспользовались свойством $\delta(a \pm bx) = \frac{1}{b} \delta\left(\frac{a}{b} \pm x\right)$.

Вычисление U несколько громоздко. Приведем лишь результат [3, с. 476 – 480]

$$U^2 = \frac{2\hbar C^2 q^2}{9NM\omega_q} \bar{n}_i. \quad (5)$$

Здесь M – масса колеблющегося атома; N – число атомов в кристалле; C – некоторая константа, имеющая размерность энергии и характеризующая интенсивность взаимодействия электрона с решеткой.

Из (5) непосредственно вытекает выражение для вероятности перехода, которое позволяет вычислить время релаксации электрона

$$\tau = \frac{2\sqrt{2}}{\pi^3} \frac{a^3 M m^{*2} k_0 T_D}{\hbar^2 C^2} \left(\frac{T_D}{T}\right) \varepsilon^{\frac{3}{2}}$$

и

$$\bar{l} = \bar{v}_F \tau = \frac{4}{\pi^3} \frac{a^3 M k_0 T_D}{\hbar^2 C^2} \left(\frac{T_D}{T}\right) \varepsilon^2. \quad (6)$$

Из формулы (6) можно показать, что $\bar{l} \gg a$. С точки зрения классической механики длина свободного пробега электрона в кристалле должна быть порядка

постоянной решетки. Большие длины свободных пробегов электронов, вытекающие из теории и наблюдаемые в опыте, свидетельствуют о том, что движение электрона подчиняется законам квантовой механики.

Список литературы

1. Займан Дж. Электроны и фононы: Пер. с англ. – М.: ИЛ, 1962. – 612 с.
2. Блатт Ф. Физика электронной проводимости в твердых телах: Пер. с англ. – М.: Мир, 1971. – 470 с.
3. Ансельм А.И. Введение в теорию полупроводников. – М.: Наука, 1978. 616 с.
4. Займан Дж. Принципы теории твердого тела: Пер. с англ. – М.: Мир, 1974. – 416 с.
5. Брандт Н.Б., Чудинов С.М. Электронная структура металлов. – М.: Изд-во МГУ, 1973. 332 с.
6. Абрикосов А.А. Введение в теорию нормальных металлов. – М.: Наука, 1972. – 288 с.
7. Шифф Л. Квантовая механика: Пер. с англ. – М.: ИЛ, 1959. – 473 с.

Relaxation Time of Electron Conduction in Metal

A.N. Pchelintsev, V.A. Shishin

Department of Physics, TSTU

Key words and phrases: grid disturbance; probability of shape elastic scattering; relaxation time.

Abstract: The process of charge carrier scattering in metals on longitudinal oscillations of crystal grid is examined. The logical conclusion of expression for relaxation time of electron conduction is given.

Relaxationszeit der Leitfähigkeitselektronen im Metall

Zusammenfassung: Es wird der Prozess der Zerstreuung der Ladungsträger in den Metallen auf den Längsschwingungen des Kristallgitters untersucht. Es ist die aufeinanderfolgende Schlußfolgerung der Äußerung für die Zeit der Relaxation des Leitfähigkeitselektrons angeführt.

Temps de la relaxation des électrons de conduction dans le métal

Résumé: On étudie le processus de la dispersion des porteurs de charge dans les métaux sur les oscillations longitudinales du réseau cristallin. A la base des représentations contemporaines on donne une conclusion séquentielle sur l'expression de la relaxation des électrons de conduction.