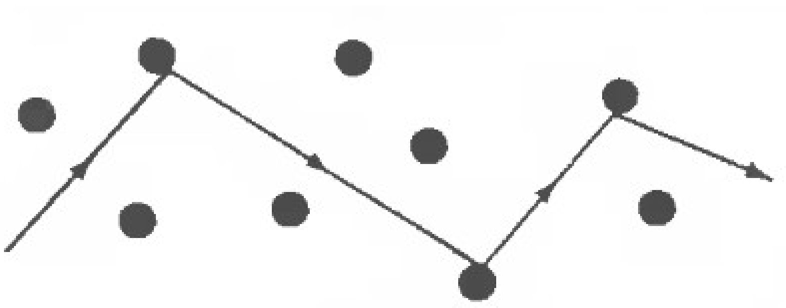
Modern fizika vegyészmérnököknek

5. óra: Vezetési jelenségek klasszikus leírása: a Drude-modell

Budapest, 2022. október 12.

Célunk: egyszerű számolható modell a fémek vezetési jelenségeire. Minta: a kinetikus gázelmélet



Paul Drude, 1900: Áram:
Atomtörzsek között pattogó elektronok szállítják a töltést

$$\vec{F} = m\vec{a}$$
$$\vec{F} = -e\vec{E} - e\vec{v} \times \vec{B}$$

+ elektronok pattogása

$$\vec{j} = -ne\langle\vec{v}\rangle$$

csak a külső E és B tér

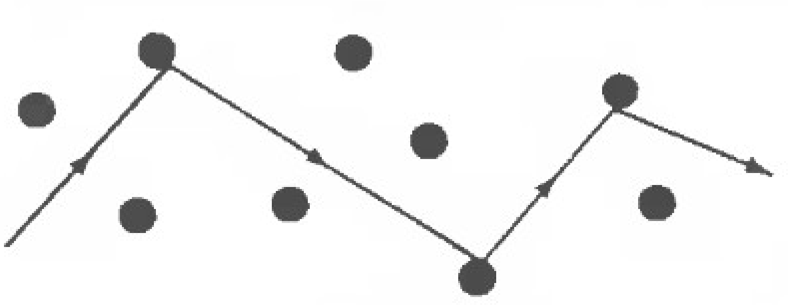
fajlagos vezetőképesség:

$$\sigma = \frac{e^2\tau n}{m}.$$

Hall-ellenállás:

$$\rho_{xy} = -\rho_{yx} = \frac{B}{ne}$$

Drude modell alapfeltevései: klasszikus mozgás, független elektronok, szabad elektronok

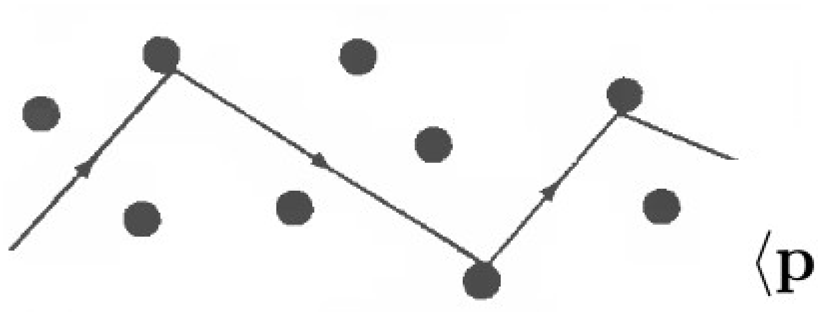


1. ütközés előtt: -e töltésű elektron, klasszikus pályán mozog (Newton), csak a külső elektromos és mágneses tér hat rá.
2. ütközés: elektron azonnal elfelejti sebességét
3. Ütközések egyenletes $1/\tau$ rátával: Minden dt idő alatt dt/τ vszínűséggel
4. ütközés után: termalizáció, véletlen irányú és nagyságú sebesség

Fontos központi paraméter: τ relaxációs idő - két ütközés közötti átlagos idő

1.: megjegyzés: NEM hat rá:
- atomtörzsek elektromos tere (szabad elektron-közelítés)
- többi elektron elektromos tere (független elektron-közelítés)

Az elektronok mozgására könnyen felállíthatunk egy egyenletet



$$\langle \mathbf{p}(t+dt) \rangle = \left(1 - \frac{dt}{\tau}\right)(\mathbf{p}(t) + \mathbf{F}dt) + \mathbf{0}\, dt/\tau$$

kis dt idő alatt
az elektron...

....vagy nem ütközik... , vagy ütközik

átrendezve, dt-ben elsőrendig:

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \mathbf{F} - \frac{\mathbf{p}}{\tau}$$

ahol F a külső erőket jelenti:

$$\mathbf{F} = -e(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})$$

Stacionárius állapot: az elektronok sodródnak, sebességük várható értéke állandó

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \mathbf{F} - \frac{\mathbf{p}}{\tau}$$

mint egy viszkózus súrlódási erő (pl. vízben eső tárgyra Stokes)

→ külső erő nélkül : $\mathbf{p}(t) = \mathbf{p}_{initial}\, e^{-t/\tau}$

Ha csak elektromos tér van, az állandósult állapot, dp/dt = 0:

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = 0 \Longrightarrow \quad m\mathbf{v} = \mathbf{p} = -e\tau\mathbf{E} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{j} = -en\mathbf{v} = \frac{e^2\tau n}{m}\mathbf{E}$$

Áram arányos az elektromos térrel.
A fajlagos vezetőképesség:

$$\mathbf{j} = \sigma\mathbf{E}$$

$$\boxed{\sigma = \frac{e^2\tau n}{m}.}$$

$$\sigma = \frac{1}{\rho} \qquad R = \rho\frac{L}{A}$$

Közepes szabad úthossz szobahőmérsékleten kb. az atomtörzsek távolságának adódik

Fontos központi paraméter: τ relaxációs idő - két ütközés közötti átlagos idő

közepes szabad úthossz ℓ : két ütközés közti átlagos távolság

$$\ell = v_0 \tau, \qquad \tfrac{1}{2} m {v_0}^2 = \tfrac{3}{2} k_B T.$$

$v_0 = 10^7$ cm/sec $\rightarrow$ ℓ = 1..10 Å = $10^{-10}..10^{-9}$ m

Fémek fajlagos ellenállása hőmérséklettel nő

Miért?

Drude-modell:
közepes szabad úthossz ℓ hőmérsékletfüggetlen

T nő
→ termális v nő
→ τ csökken
→ σ csökken
→ ρ nő.

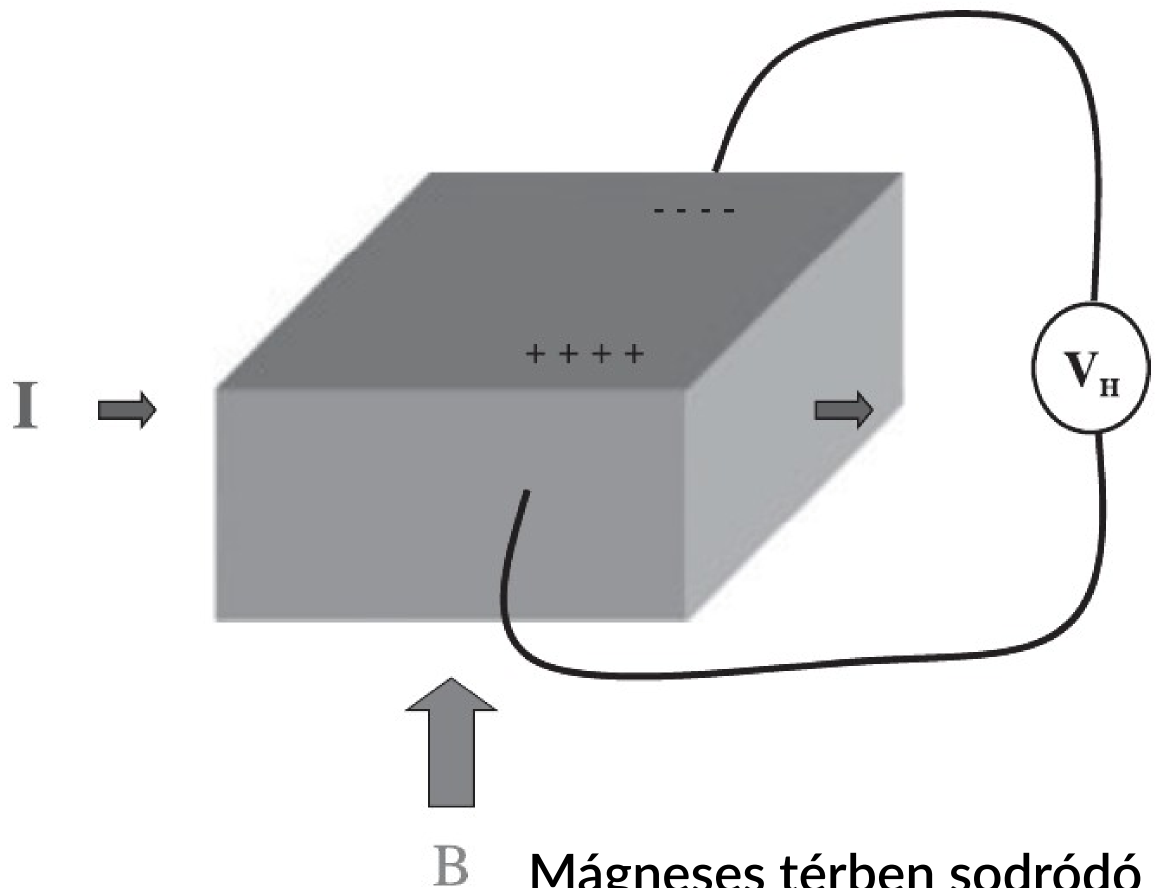
helyesnek tűnő indoklás, de teljesen hamis

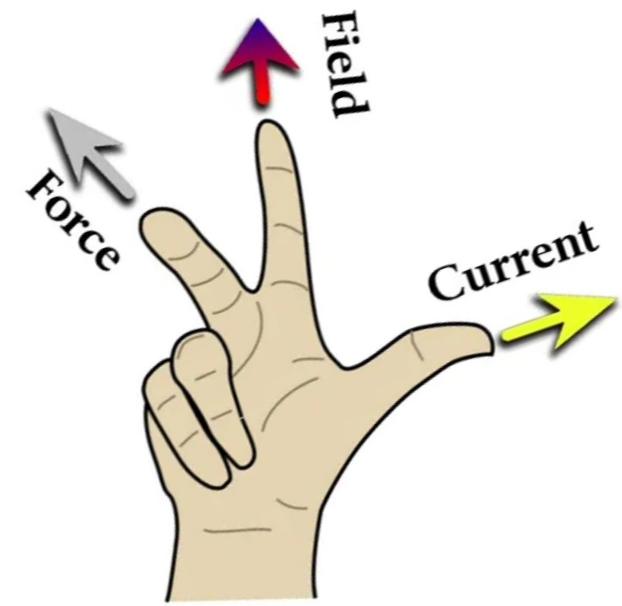
ELECTRICAL RESISTIVITIES OF SELECTED ELEMENTS[a]

ELEMENT	77 K	273 K	373 K	$\frac{(\rho/T)_{373\text{ K}}}{(\rho/T)_{273\text{ K}}}$
Li	1.04	8.55	12.4	1.06
Na	0.8	4.2	Melted	
K	1.38	6.1	Melted	
Rb	2.2	11.0	Melted	
Cs	4.5	18.8	Melted	
Cu	0.2	1.56	2.24	1.05
Ag	0.3	1.51	2.13	1.03
Au	0.5	2.04	2.84	1.02
Be		2.8	5.3	1.39
Mg	0.62	3.9	5.6	1.05
Ca		3.43	5.0	1.07
Sr	7	23		
Ba	17	60		
Nb	3.0	15.2	19.2	0.92
Fe	0.66	8.9	14.7	1.21
Zn	1.1	5.5	7.8	1.04
Cd	1.6	6.8		
Hg	5.8	Melted	Melted	
Al	0.3	2.45	3.55	1.06
Ga	2.75	13.6	Melted	
In	1.8	8.0	12.1	1.11
Tl	3.7	15	22.8	1.11
Sn	2.1	10.6	15.8	1.09
Pb	4.7	19.0	27.0	1.04
Bi	35	107	156	1.07
Sb	8	39	59	1.11

[a] Resistivities in microhm centimeters are given at 77 K (the boiling point of liquid nitrogen at atmospheric pressure), 273 K, and 373 K. The last column gives the ratio of ρ/T at 373 K and 273 K to display the approximate linear temperature dependence of the resistivity near room temperature.
Source: G. W. C. Kaye and T. H. Laby, *Table of Physical and Chemical Constants*, Longmans Green, London, 1966.

Keresztezett elektromos és mágneses terek: Hall-effektus





$$\mathbf{F} = -e(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})$$

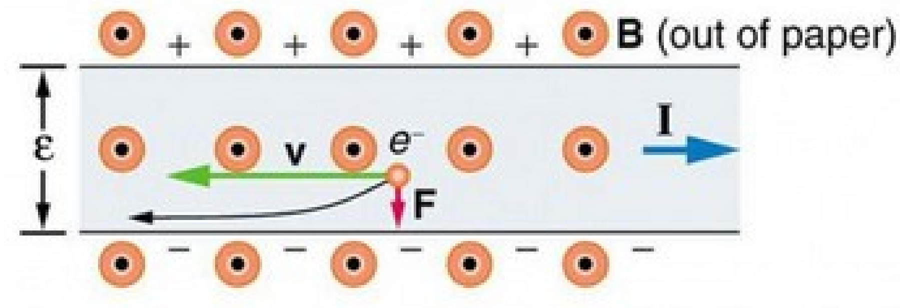
Mágneses térben sodródó elektronokra hat a Lorentz-erő
→ elektronok eltérülnek
→ felhalmozódnak a minta egyik oldalán
→ keresztirányú elektromos tér keltődik
→ Hall-feszültség mérhető

Hall-effektus fontossága: megmérhető, milyen töltésűek az áramot hordozó részecskék!

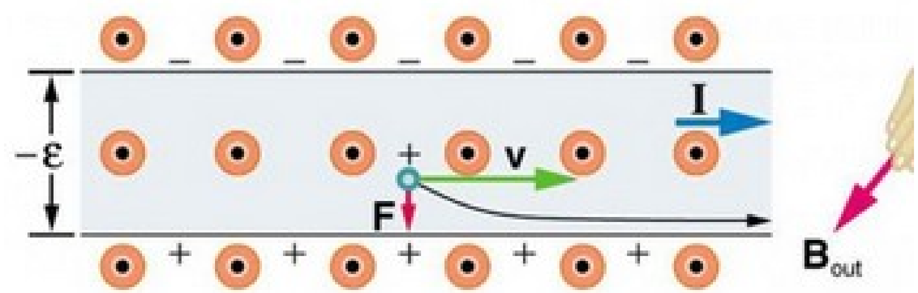
Áram folyik balról jobbra.

Melyik a valóság?

a) negatív töltések jobbról balra



b) pozitív töltések balról jobbra



$$\mathbf{F} = -e(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})$$

Eltérítő erő iránya csak az áramiránytól függ, mindig “lefele”
→ Lent a) negatív b) pozitív többlettöltés alakul ki
→ Keresztirányú (Hall-) feszültséget mérve megvan a válasz!

A Hall-effektust a Drude-modellből kiszámolhatjuk

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \mathbf{F} - \frac{\mathbf{p}}{\tau}$$

$$\mathbf{F} = -e(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})$$

$$0 = -e\mathbf{E} + \frac{\mathbf{j} \times \mathbf{B}}{n} + \frac{m}{ne\tau}\mathbf{j}$$

$$\mathbf{E} = \left(\frac{1}{ne}\mathbf{j} \times \mathbf{B} + \frac{m}{ne^2\tau}\mathbf{j}\right).$$

$$\mathbf{E} = \rho\mathbf{j}$$

Longitudinális fajlagos ellenállás:

$$\rho_{xx} = \rho_{yy} = \rho_{zz} = \frac{m}{ne^2\tau}$$

Transzverz (Hall-) fajlagos ellenállás:

$$\rho_{xy} = -\rho_{yx} = \frac{B}{ne}$$

Transzverz ellenállás:

$$U_y = R_H BI = \frac{IB}{ne}$$

Alacsony hőmérsékleten, erős (de nem túl erős) mágneses térben, tiszta minták követik a Hall-effektust, de a hordozott töltés néha pozitív!

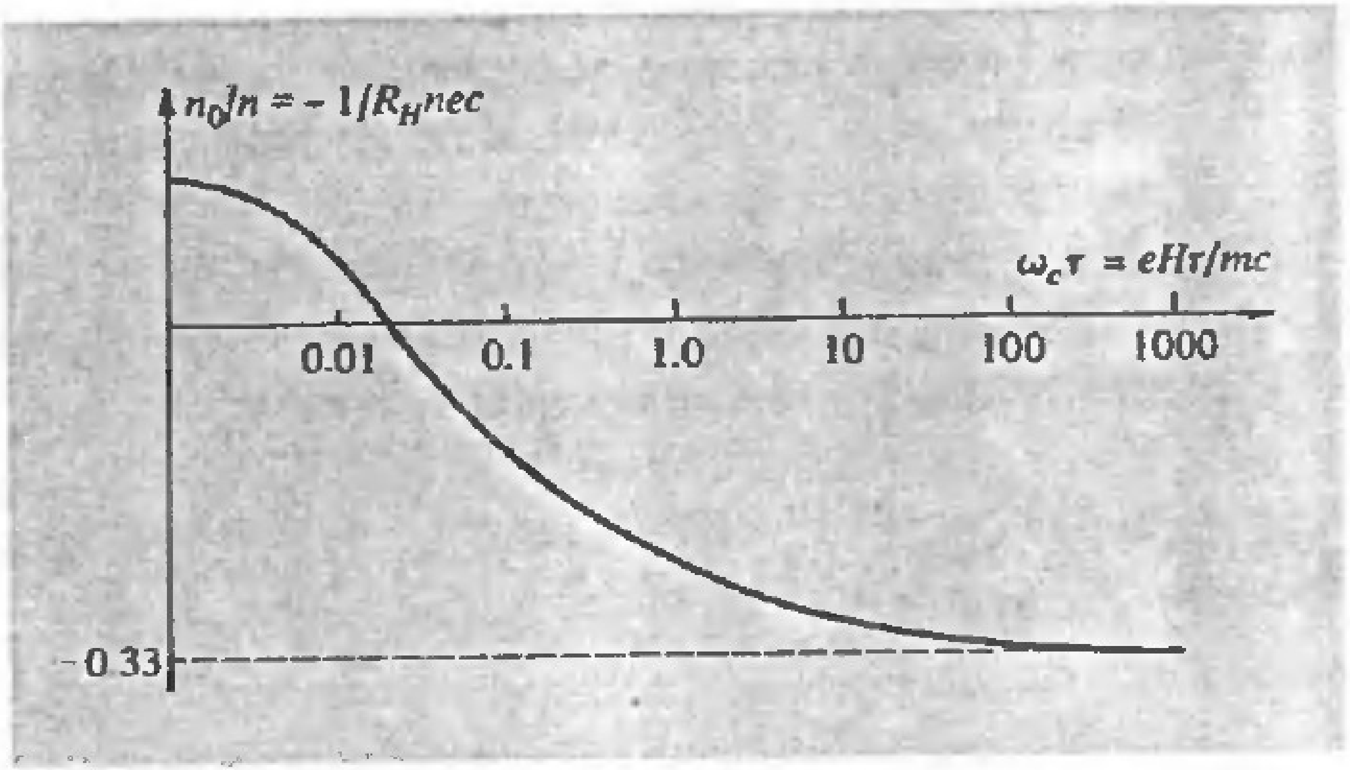
Table 3.1 Comparison of the valence of various atoms to the valence predicted from the measured Hall coefficient.

Material	$\dfrac{1}{-e\,R_H\,n_{atomic}}$	Valence
Li	.8	1
Na	1.2	1
K	1.1	1
Cu	1.5	1
Be	-0.2*	2
Mg	-0.4	2
Ca	1.5	2

Here n_{atomic} is the density of atoms in the metal and R_H is the measured Hall coefficient. In Drude theory, the middle column should give the number of electrons per atom, i.e., the valence. For monovalent atoms, the agreement is fairly good. But for divalent atoms, the sign can even come out wrong! The * next to Be indicates that its Hall coefficient is anisotropic. Depending on which angle you run the current you can get either sign of the Hall coefficient!

Egyes anyagoknál a töltéshordozó töltése függ hőmérséklettől, mágneses tértől

Figure 1.4
The quantity $n_0/n = -1/R_H nec$, for aluminum, as a function of $\omega_c\tau$. The free electron density n is based on a nominal chemical valence of 3. The high field value suggests only one carrier per primitive cell, with a positive charge. (From R. Lück, *Phys. Stat. Sol.* **18**, 49 (1966).)



$$\omega_C = \frac{eB}{m}$$

Érdekesség: a Drude-modell (szerencsés véletlen): visszaadja, hogy a hővezetés összefügg az elektromos vezetéssel...

$$\mathbf{j}^q = -\kappa \nabla T.$$

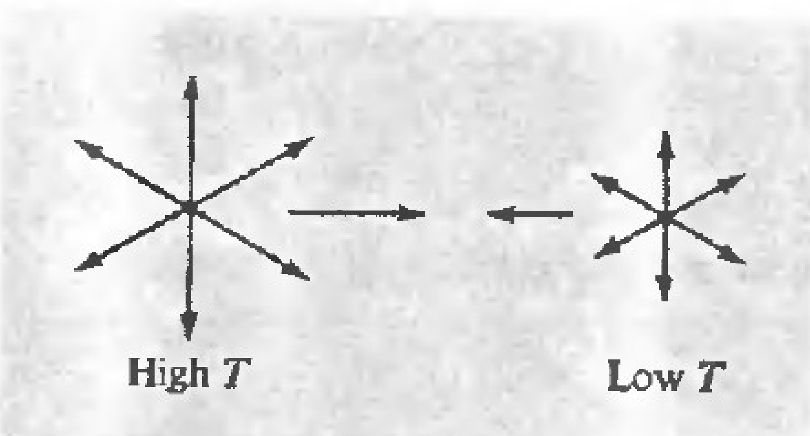


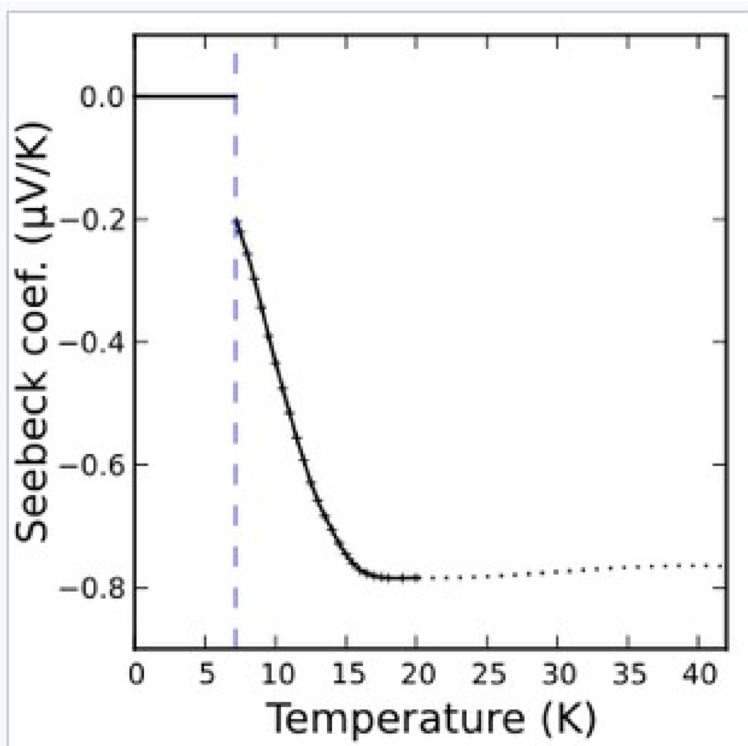
Figure 1.6
Schematic view of the relation between temperature gradient and thermal current. Electrons arriving at the center of the bar from the left had their last collision in the high-temperature region. Those arriving at the center from the right had their last collision in the low-temperature region. Hence electrons moving to the right at the center of the bar tend to be more energetic than those moving to the left, yielding a net thermal current to the right.

$$L = \frac{\kappa}{T\sigma} = \frac{3}{2}\left(\frac{k_B}{e}\right)^2 \approx 1.11 \times 10^{-8}\ \mathrm{WattOhm/K^2}$$

Viszont a Drude-modell kb. 100-szoros eltérést ad a Seebeck-effektusra

$$\mathbf{E} = Q\nabla T,$$

$$Q = -\frac{k_B}{2e} = -0.43 \times 10^{-4} \text{ volt/K}.$$



Absolute Seebeck coefficient of lead at low temperature, according to Christian, Jan, Pearson, Templeton (1958). Below the critical temperature of lead (indicated by the dashed line, approximately 7 K) the lead is superconducting.

Drude-modell összegzése: előnyök/hátrányok, mire működik, mire nem

Egyszerű modell, könnyen végigszámolható, kinetikus gázelmélethez hasonlít

Klasszikusan mozgó elektronok	✗ Kvantumos mozgás
Független elektronok	✓ Kvázirészecskék
Szabad elektronok	✗ Rácsban mozgó elektronok
Szóródás atomtörzseken	✗ Szóródás fononokon
Ohm-törvényt visszaadja	
Hall-effektust visszaadja, de néha pozitív töltés kell!	✗ sávelmélet: elektronok/lyukak
Wiedemann-Franz-törvényt visszaadja	✗ szerencsés véletlen
Seebeck-effektusnál 100x nagyobb értéket jósol	✗ nincs szerencse

Általában nem jó, de félvezetőkre működhet.