

[www.mientayvn.com](http://www.mientayvn.com)

Dịch tiếng anh chuyên ngành khoa học tự nhiên và kỹ thuật.

Dịch các bài giảng trong chương trình học liệu mở của học viện MIT, Yale.

Tìm và dịch tài liệu phục vụ cho sinh viên làm seminar, luận văn.

Tại sao mọi thứ đều miễn phí và chuyên nghiệp ???

Trao i tr c tuy n t i:

[http://www.mientayvn.com/chat\\_box\\_li.html](http://www.mientayvn.com/chat_box_li.html)

CHÖÖNG V  
KHÍ ÑIËN TÖÛTÖÏ DO  
TRONG KIM LOAÏ



# I. LÝ THUYẾT CỔ ĐIỂN VỀ KHÍ NIÊN TỰ DO CỦA DRUDE

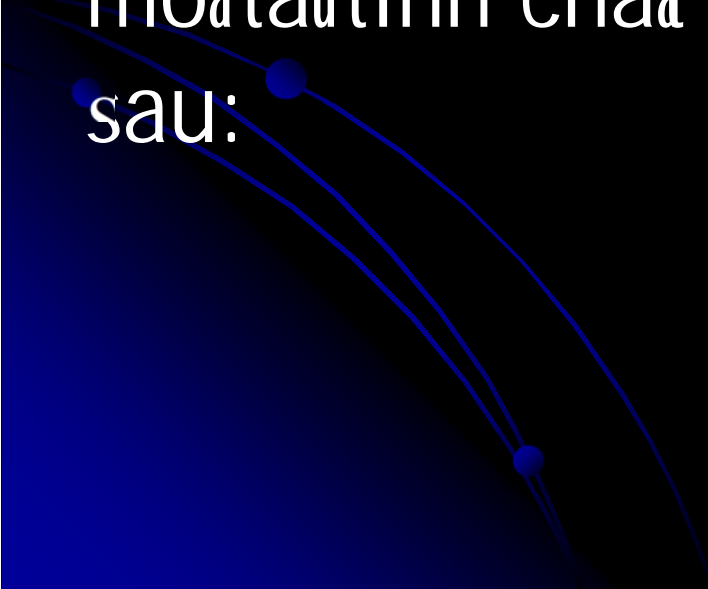
Model Drude – Lorentz ( 1900 – 1905 )

- Kim loại gồm các ion dương nặng nằm ở các nút mạng
- Các **niên tử** hòa trộn tách khỏi nguyên tử và chuyển động tự do trong kim loại tạo thành khí **niên tử** tự do.



Paul Drude

Theo Drude các electron dẫn điện trong kim loại nhờ các hạt có năng lượng tối đa trong "hộp tinh thể" và có thể dùng thuyết năng lượng hoặc phân tử để mô tả tính chất của nó dựa trên các giả thiết sau:



❖ Các niên tô khi chuyển động luôn bò và chằm.

❖ Giữa các va chằm các niên tô chuyển động tuân theo các ñịnh luật của Newton.

❖ Thời gian bay tời do trung bình  $\tau$  của các niên tô không phụ thuộc vào vị trí và vận tốc của nó

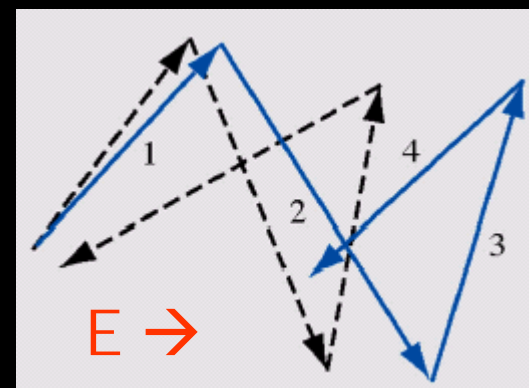
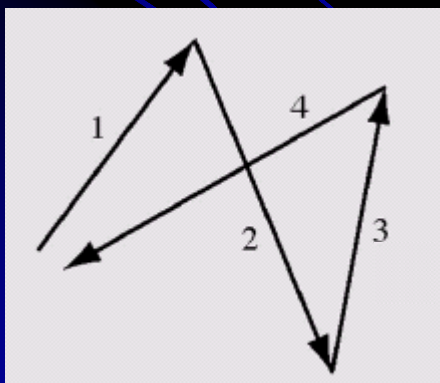
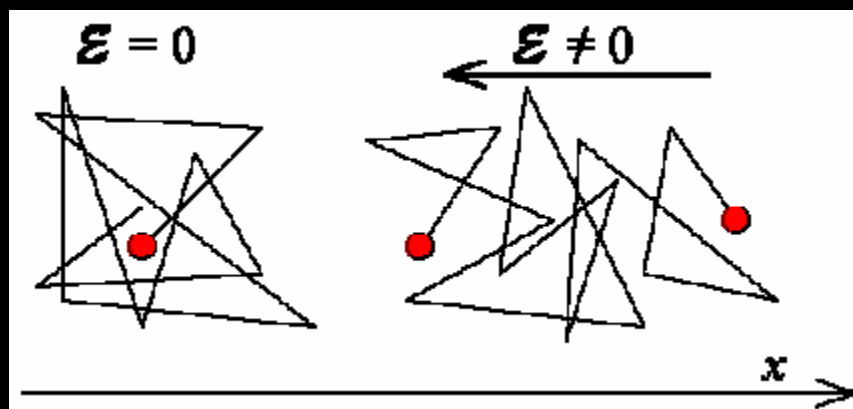
❖ Khi va chằm vận tốc của niên tô bò thay ñổi ñốt ñốt  $\Rightarrow$  cô chế chính làm các niên tô cân bằng nhiệt với môi trường xung quanh hay trở lại trạng thái cân bằng khi ngừng ngoài lốc tác ñộng.

Khi không có điện trường:

Các electron chuyển động nhanh và thông xuyên thay đổi chiều.

Khi có điện trường:

1. Vẫn có chuyển động hỗn loạn
2. Thêm chuyển động trung bình có hướng theo phương của điện trường



Trong điện trường, electron có hai loại vận tốc :  $v_T$  và  $v_d$ .  
Vì  $v_d \ll v_T$  nên chuyển động có hướng của tập thể electron không ảnh hưởng đáng kể đến thời gian bay tới do  $\tau$  và do đó điện trở vẫn  $\sigma$

Khi đặt lên một vật dẫn điện một điện trường  $\vec{E}$  thì các điện tử do trong kim loại chịu tác dụng của lực điện trường chuyển động có hướng với vận tốc trung bình  $v_d$  (vận tốc trôi).

Do vậy trong vật sẽ xuất hiện một dòng điện có mật độ dòng theo định luật Ohm:

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

Với  $\sigma =$  điện trở riêng của vật dẫn.

Lực điện trường tác dụng lên điện tử là

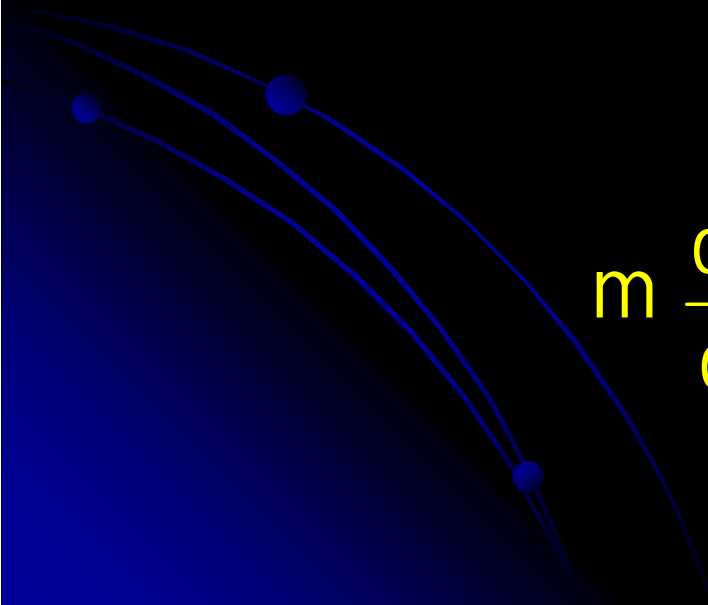
$$\vec{F}_e = -e \vec{E}$$

Mặt khác trong quá trình chuyển năng các **niên tồ**  
**luôn bò tằm xài trên mạng tinh thể**  $\Rightarrow$  tổng năng với  
lực ma sát có dạng:

$$\vec{F}_{ms} = -\frac{1}{\tau} m \vec{v}$$

Theo ñịnh luật II của Newton ta có

$$\vec{F}_e + \vec{F}_{ms} = m \vec{a}$$

$$m \frac{dv}{dt} = -eE - \frac{1}{\tau} mv$$




Chọn điều kiện ban đầu  $t = 0 : v(0) = 0$  ta có nghiệm của phương trình có dạng:

$$v = \frac{eE}{m} \left( 1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \right)$$

Ban đầu  $v(0) = 0 \Rightarrow \vec{F}_{ms} = 0$ .

Dưới tác dụng của lực  $\vec{F}_e$  vật chuyển động nhanh dần  $\Rightarrow$  tăng dần cho đến khi ổn định thì:

$$\vec{F}_e + \vec{F}_{ms} = 0$$

$\Rightarrow$  khi đó nên tốc độ chuyển động đều với vận tốc không đổi  $v_d$ .

$$\Rightarrow \frac{1}{\tau} m v_d = - e E \Rightarrow v_d = - \frac{e E}{m} \tau$$

Ta coi

$$J = n_e e v_d = n_e e \frac{e E}{m} \tau = \frac{n_e e^2 E}{m} \tau$$

Mặt khác:

$$J = \sigma E \Rightarrow \sigma = \frac{n_e e^2 \tau}{m} = n_e e \mu$$

$$\mu = \frac{e \tau}{m} = \text{hệ số linh động của điện tử}$$

$\tau$  = thời gian hồi phục;  $n_e$  = nồng độ điện tử

Với  $j \sim 1 \text{ A/cm}^2$ ;  $n \sim 10^{22} \text{ cm}^{-3}$  thì  $v_d \sim 10^{-3} \text{ cm/s}$

Nếu coi các điện tử do trong kim loại nhỏ khí điện tử thì vận tốc nhiệt  $v_T$  của các điện tử có thể tính theo công thức:

$$\frac{1}{2} m v_T^2 = \frac{3}{2} k T$$

## Ý nghĩa của $\tau$ :

- $\tau$  có thời gian của thời gian cần để cho tốc độ thiết lập cân bằng của hệ
- $\tau$  có thể coi là thời gian trung bình giữa 2 lần va chạm của điện tử. Hay thời gian trôi đi trung bình của điện tử
- $\tau$  phụ thuộc vào vận tốc chuyển động nhiệt  $v_T$  của điện tử.  $v_T$  càng lớn thì  $\tau$  càng nhỏ
- $\tau$  không phụ thuộc vào vận tốc cuốn  $v_d$  của điện tử tức là không phụ thuộc vào điện trường ngoài. Do nó là đặc tính của môi trường không phụ thuộc vào điện trường ngoài.
- $\tau$  càng nhỏ thì hệ càng dễ mất cân bằng càng nhanh.
- $\tau =$  Thời gian mà sau đó  $v_d$  giảm đi  $e = 2,718$  lần, nó có gọi là thời gian hồi phục.
- Bằng thực nghiệm ta đo được  $\sigma$  (dựa vào định luật Ohm)  
 $\Rightarrow \tau \approx 10^{-14} \div 10^{-15} \text{s}$ .

Quang năng bay tới do trung bình của niên  $\lambda$

Ta có

$$\lambda = v_T \cdot \tau$$

Trong đó

$$v_T \approx 10^7 \text{ cm/s} ; \tau \approx 10^{-14} \div 10^{-15} \text{ s}$$

$$\Rightarrow \lambda \sim 10 \text{ \AA}$$

THỜI NGHIỆM CHO THẤY

### ❖ Ô nhiễm thấp

Nói với các tinh thể kim loại tinh khiết ở độ dẫn điện  $\sigma$  ô nhiễm thấp lớn hơn ô nhiễm thấp.

$\Rightarrow$  Các tinh thể kim loại tinh khiết  $\lambda$  lớn hơn nhiều kích thước  $\text{\AA}$ .

## VÍ DỤ

Ñòng rất sạch

$$\sigma(4^{\circ}\text{K}) = 10^5 \sigma(300^{\circ}\text{K})$$

$$\tau = 3 \cdot 10^{-9} \text{s}; v = 1,5 \cdot 10^8 \text{ cm/s}$$

$$\Rightarrow \lambda(4^{\circ}\text{K}) = v\tau = 0,3 \text{ cm}$$

Một số kim loại khác ở nhiệt độ  $\sim 4^{\circ}\text{K}$ :

$$\lambda \sim 10 \text{ cm}$$

$\Rightarrow$  Nếu coi tán xạ chính của  $e^-$  là do mạng tinh thể thì  $\lambda \sim \text{angstrom} \Rightarrow$  Không phù hợp với kết quả thực nghiệm  $\Rightarrow$  Mô hình Drude chưa phù hợp với thực nghiệm.

## ❖ Ônhiet ñoäcao

Thöc nghieäm cho thaáy ônhiet ñoäcao:

$$\sigma \sim \frac{1}{T}$$

Theo lyùthuyet coãnieän, ônhiet ñoäcao:

$$\sigma \sim T^{-3/2}$$

⇒ Thuyet coãnieän không phuøhüp vöi thöc nghieäm

Kim loại	Điện trở suất ( $\Omega \cdot m$ ) <sup>-1</sup>
Bạc	$6,8 \cdot 10^{-8}$
Đồng	$6,0 \cdot 10^{-8}$
Vàng	$4,3 \cdot 10^{-8}$
Nhôm	$3,8 \cdot 10^{-8}$
Sắt	$1,0 \cdot 10^{-7}$
Đồng thau (70Cu-30Zn)	$1,6 \cdot 10^{-7}$
Bạch kim	$0,94 \cdot 10^{-7}$
Thép không gỉ	$0,2 \cdot 10^{-7}$

# SỐ DẪN NHIỆT CỦA KHÍ NHIÊN TỐU

Nhiên tốu trong kim loại và la~~o~~ **hất táu** ~~niên~~ và ~~o~~ **hất táu** ~~niên~~ **nhiet**.

Wiedemann và Franz bằng thực nghiệm và Lorentz bằng lí thuyết đã thiết lập mối liên hệ giữa **he số dẫn** ~~niên~~  $\sigma$  và **he số dẫn** ~~niên~~ **nhiet**  $K$  như sau:

$$\frac{K}{\sigma} = LT$$

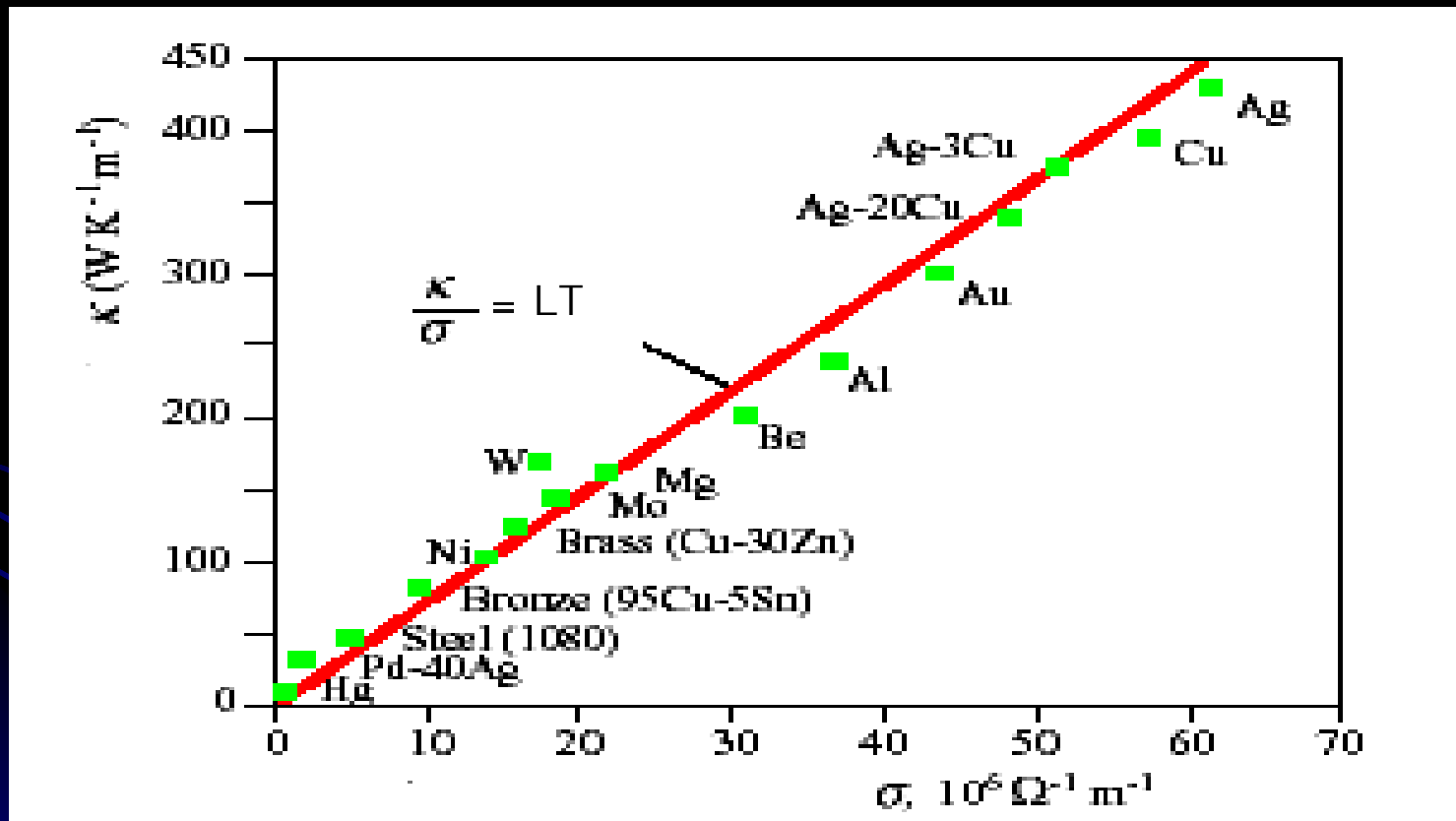
Trong đó

$L = \text{const} = \text{soá Lorentz}$



# VÍ DỤ

Sơ phụ thuộc của hệ số dẫn nhiệt  $K$  vào nồng độ dẫn điện  $\sigma$  của một số kim loại ở  $20^{\circ}\text{C}$ .



$L$  là một hằng số bằng  $2,3 \cdot 10^{-8}$  ( watt. $\Omega$  /  $\text{m}^2$  )

# Giaù trò thöïc nghiäm của hàng số Lorentz

( ñôn vò  $10^{-8} \text{ watt} \cdot \Omega / \text{K}^2$  )

Kim loãï	273 K	373 K
Cu	2,23	2,33
Mo	2,61	2,79
Pd	2,59	2,74
Ag	2,31	2,37
Sn	2,52	2,49
Pt	2,51	2,60
Bi	3,31	2,89

Theo thuyết ñoäng hoïc phaân töü

$$K = \frac{1}{3} c_v \langle v \rangle \lambda = \frac{1}{3} \left( \frac{3}{2} \right) n k_B v_T \cdot (v_T \cdot \tau)$$

$$K = \left( \frac{1}{2} \right) n k_B v_T^2 \tau$$

$$\frac{K}{\sigma} = \left( \frac{3}{2} \right) \left( \frac{k_B}{e} \right)^2 T$$

$$L = \left( \frac{3}{2} \right) \left( \frac{k_B}{e} \right)^2$$

## NHẬN XÉT

Gia trị của  $L$  theo công thức trên tổng nó phù hợp với thực nghiệm.

Với kết quả này nên thuyết Drude cũng chấp nhận trong lịch sử phát triển của lý thuyết kim loại.

Tuy nhiên, theo thuyết này  $C_V$  lấy từ kết quả của thuyết cổ điển (nó không phù hợp với thực nghiệm)  $\Rightarrow$  Kết quả trung hợp của  $L$  là ngẫu nhiên.

Quang phổ tới do trung bình  $\lambda$  vào theo thuyết Drude rất nhỏ (angstrom) với thực nghiệm (cm)

Con nhiệt dung của khí cổ điển tới tới do theo lý thuyết rất lớn so với thực nghiệm.

$\Rightarrow$  Nếu khác phục cần lý thuyết mới.

## II. LÝ THUYẾT VỀ KHÍ NHIỆN TỰ DO CỦA SOMMERFELD

### MO HÌNH CỦA SOMMERFELD

- ❖ Các nhiệt tự do trong kim loại tạo nên khí nhiệt tự do  $\Rightarrow$  chuyển năng lượng tự do trong kim loại.
- ❖ Các nhiệt tuân theo phân bố Fermi – Dirac.
  - $\Rightarrow$  nhiệt chủ yếu nhờ chuyển năng lượng tự do trong một hoá thể có bề rộng băng kích thước tinh thể

# TÍNH SỐ TRẠNG THẠÌ CÒN AŦNG LÖÖNG E

## CAIÇH I

Nhũn gian: Xét tinh thể năng hũnng đăng khối lập phương cạnh L.

Áp dụng nhũn kiện biên Born von Karman, veic tũ sóng k nhận các giá trị giũn nhũn:

- $k_i = \frac{2\pi}{L} n_i$

- Với  $i = x, y, z; n_i = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3$

Do nhũn năng lượng cũng trũn nhũn giũn nhũn:

$$E = \frac{\hbar^2 (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)}{2m}$$

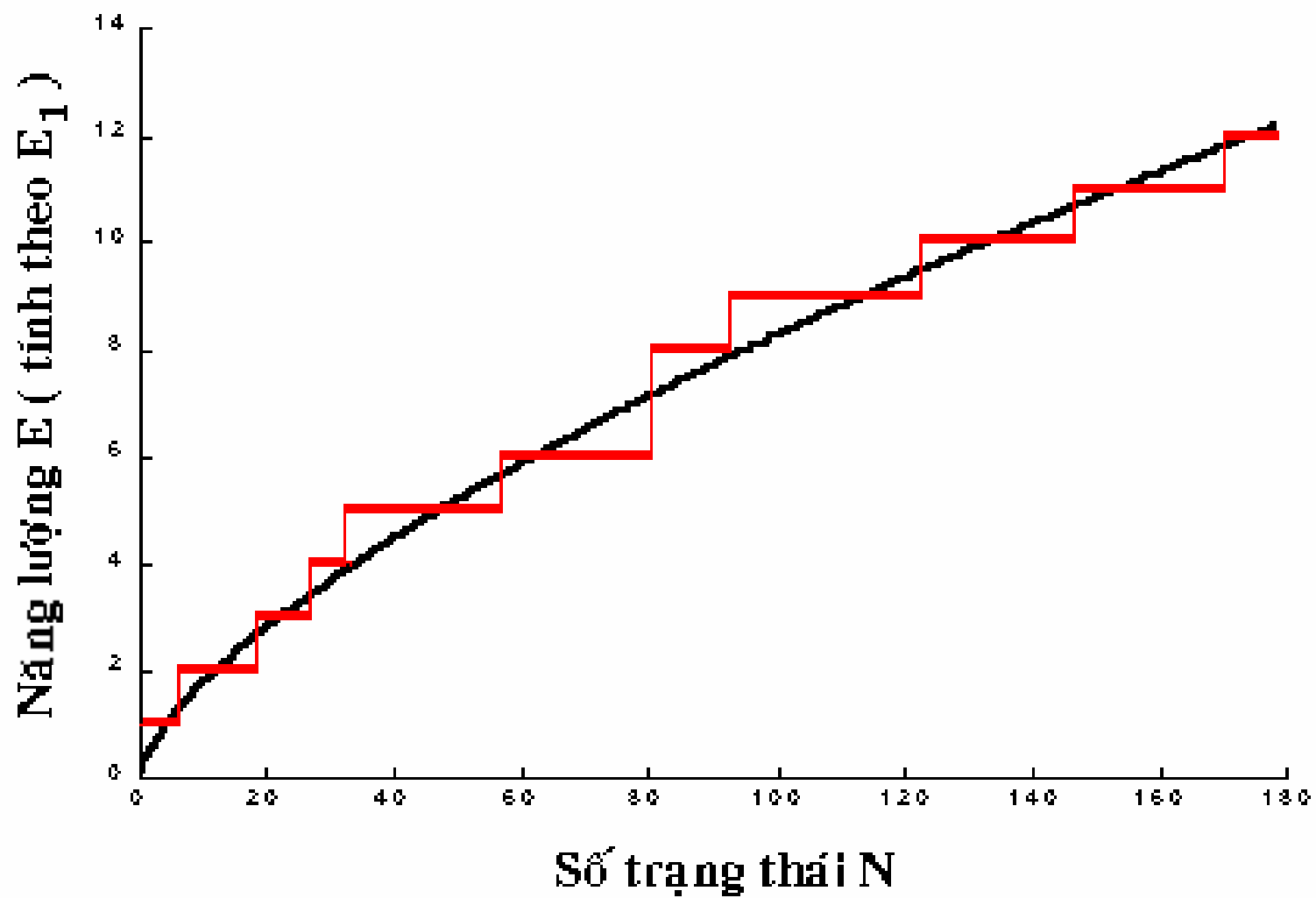
- Nhờ vậy, trạng thái của các nơ-ron trong tinh thể có thể được mô tả bằng 4 số lượng tử  $k_x, k_y, k_z$  (hay  $n_x, n_y, n_z$ ) và số lượng tử spin  $m_s$ .
- Trong cùng thời năng lượng  $E$  ta thấy với các bộ số lượng tử khác nhau ta có thể có cùng một giá trị năng lượng  $\Rightarrow$  Suy biến.

Ví dụ:

Với trạng thái có  $E_1 = \frac{\hbar^2}{2m}$  có 6 trạng thái khi chưa tính đến spin.

Với trạng thái có  $E_2 = 2E_1$  có 12 trạng thái khi chưa tính đến spin.

$\Rightarrow$  Mặt năng lượng.





# TÍNH SỐ TRẠNG THẠÌ CÒN ĂNG LỒỜNG E

## CÁCH II

Trạng thạì của ñiệñ tồ ñiệñ mô tả bằg phồg trìn Schrodinger:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi = E \Psi$$

Nghiệñ của phồg trìn cò đạg sòg phạg:

$$\Psi = C \exp i \vec{k} \cdot \vec{r} \quad \text{Vớì } k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

$$\text{Trò riệg: } E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

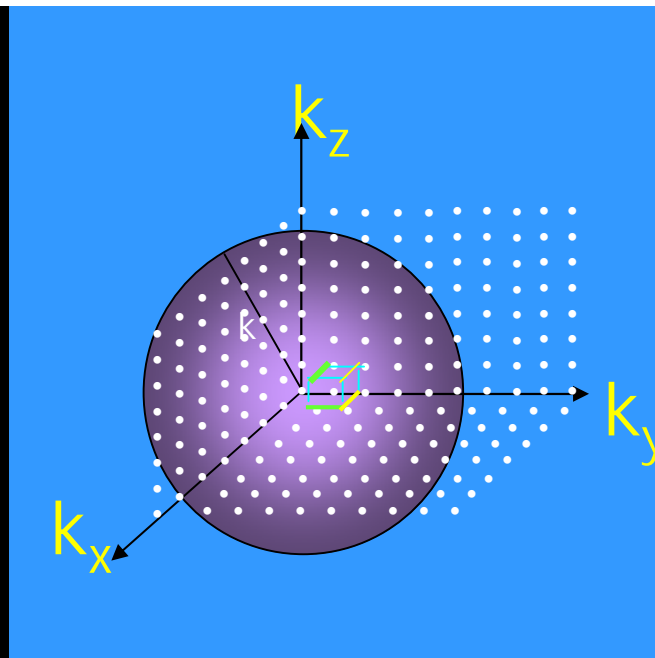
$$\text{Toạñ tồ xung lồờg: } \hat{P} = -i\hbar \nabla$$

$$\text{Ta còì } \hat{P}\Psi = \hbar \vec{k} = m \vec{v}$$

$$\text{Vậñ tồc của ñiệñ tồ } \vec{v} = \frac{\hbar \vec{k}}{m}$$

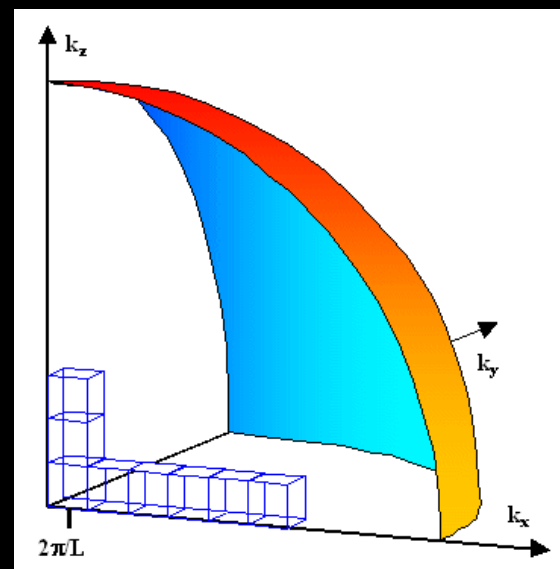
- Trong không gian  $k$ , mặt năng lượng  $E$  là mặt cầu bán kính  $k$  có thể tích:

$$V_k = \frac{4}{3} \pi k^3$$



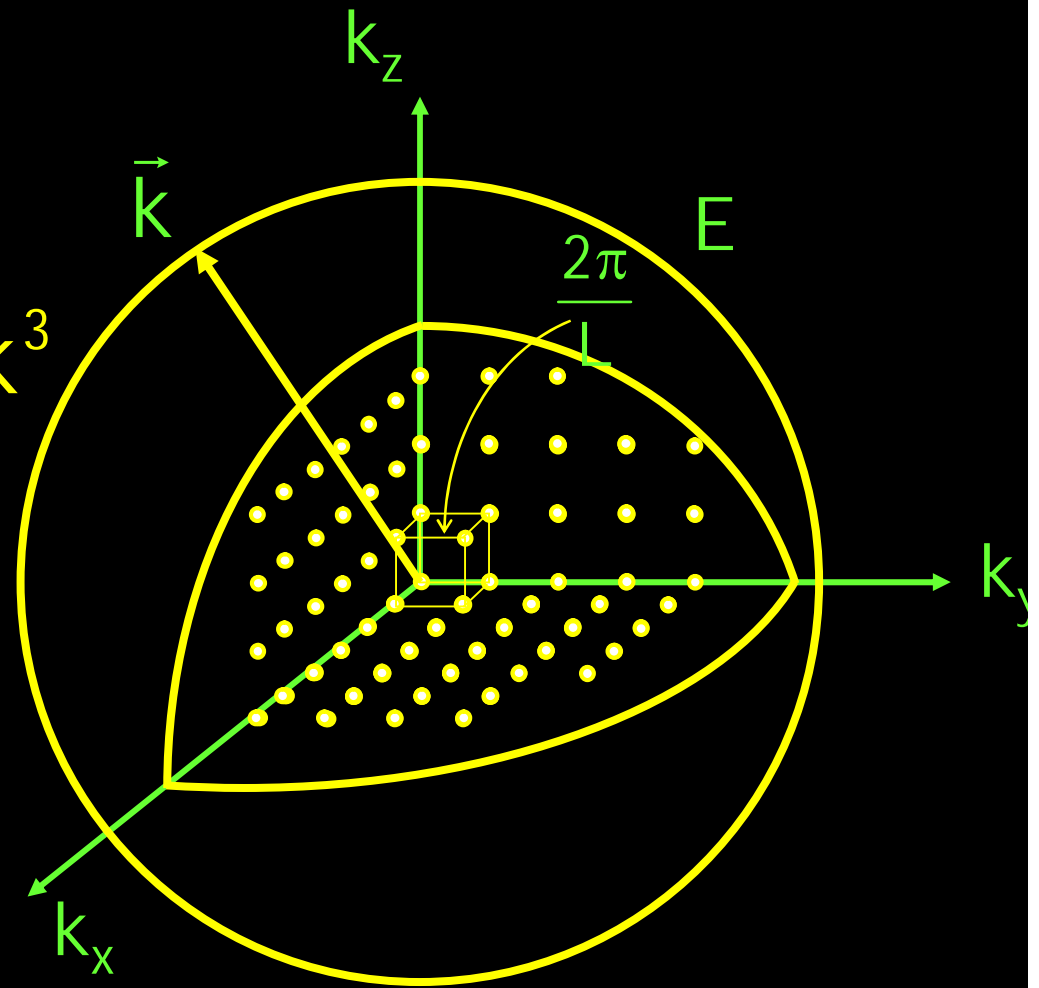
- Mỗi trạng thái ứng với một giá trị nhỏ lẻ phép của  $k$  chiếm một thể tích:

$$\left( \frac{2\pi}{L} \right)^2$$



- Số giá trị rời rạc phép  $N_k$  của  $k$  trong thể tích hình cầu có bán kính  $k \rightarrow k_{\text{max}}$

$$N_k = \frac{\frac{4}{3}\pi k^3}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3} = \frac{V}{6\pi^2} k^3$$



$$\Rightarrow g(k) = \frac{dN_k}{dk} = \frac{V}{2\pi^2} k^2 = \text{hàm mật độ trạng thái}$$

- Tổng số, số trạng thái  $N_E$  có năng lượng  $E$  trong khoảng  $0 \rightarrow E$ :

$$N_E = \frac{V}{6\pi^2} \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} E^{\frac{3}{2}}$$

$$\Rightarrow g(E) = \frac{dN_E}{dE} = \frac{V}{4\pi^2} \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} E^{\frac{1}{2}} = \text{hàm mật số trạng thái}$$

- Số điện tử trong thể tích  $V$  có năng lượng nằm trong khoảng  $E \div E + dE$  là

$$dN = 2g(E)f(E) dE$$

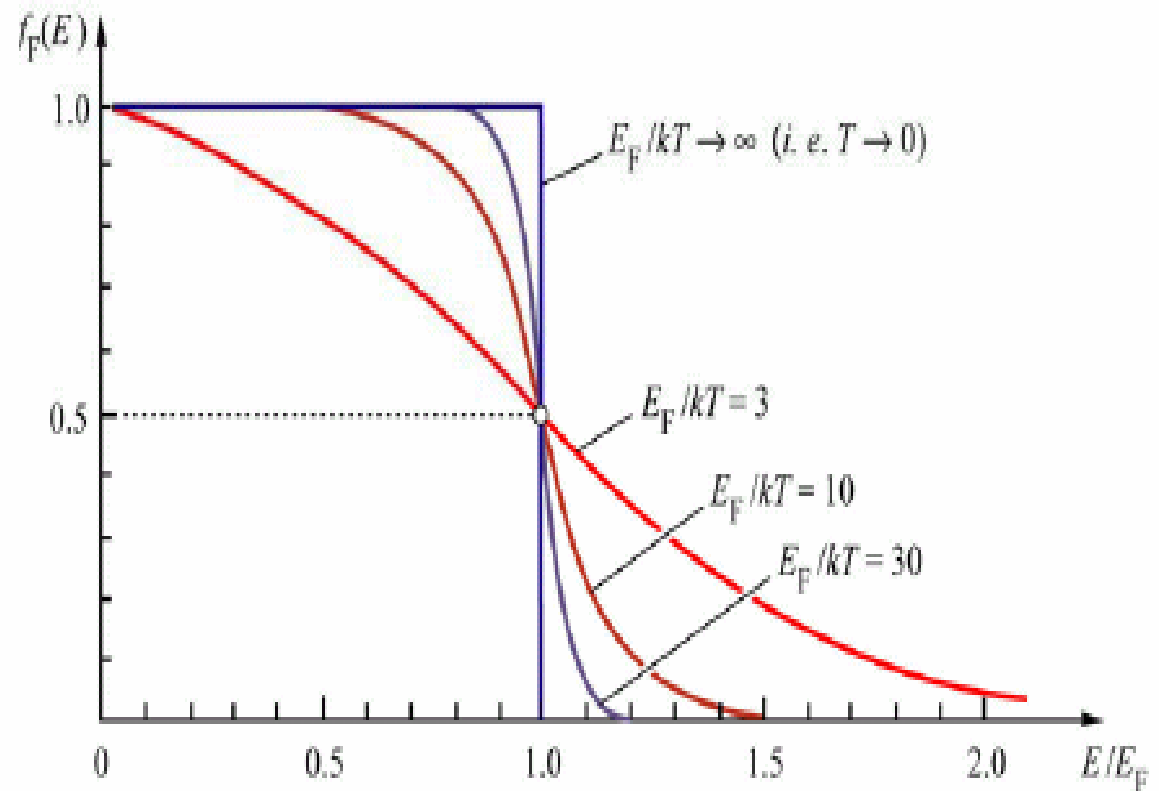
- Trong đó  $f(E)$  là hàm phân bố Fermi – Dirac.
- Thừa số 2 là do mỗi trạng thái có thể chứa 2 điện tử

# Hàm phân bố Fermi - Dirac

Theo lý thuyết của Sommerfeld, các electron gần mức Fermi đều tham gia vào quá trình trao đổi nhiệt.

Hàm phân bố Fermi-Dirac ở nhiệt độ  $T$  và  $0^\circ\text{K}$  có dạng như sau hình.

$$f(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right) + 1}$$



## Theo nguyên lí Pauli

- Trong chất rắn các mức năng lượng phân bố theo các mức năng lượng từ thấp đến cao.
- Ở  $0^\circ\text{K}$ , mức năng lượng cao nhất có mức chiếm là mức Fermi  $E_F$ .
- Vec tơ sóng ứng với mức Fermi là  $k_F$ .
- Mặt có cùng năng lượng  $E_F$  gọi là mặt Fermi.
- Nếu mặt Fermi là mặt cầu có bán kính  $k_F$  thì số

trạng thái trong mặt cầu này là

$$\frac{\frac{4}{3}\pi k_F^3}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3} = \frac{V}{6\pi^2} k_F^3$$

- Gọi  $N$  là số điện tử có trong thể tích  $V$  của tinh thể thì ta có

$$N = 2 \frac{V}{6\pi^2} k_F^3$$

$$\Rightarrow k_F = \left( 3\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{\frac{1}{3}} = (3\pi^2 n)^{\frac{1}{3}}$$

- Trong đó  $n$  = nồng độ điện tử trong kim loại.

- Suy ra:  $E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$  ;  $T_F = \frac{E_F}{k_B}$  ;  $v_F = \frac{\hbar k_F}{m}$

Một số  
thông số  
liên  
quan  
đến  
electron  
nằm trên  
mức  
Fermi

Hoà trị	Kim loại	$n \times 10^{28}$ ( $m^{-3}$ )	$k_F \times 10^8$ ( $cm^{-1}$ )	$v_F \times 10^6$ (m/s)	$E_F$ (eV)	$T_F \times 10^4$ (K)
1	Li	4,70	1,11	1,29	4,72	5,48
	Na	2,65	0,92	1,07	3,23	3,75
	K	1,40	0,75	0,86	2,12	2,46
	Rb	1,15	0,70	0,81	1,85	2,15
	Cs	0,91	0,64	0,75	1,58	1,83
	Cu	8,45	1,36	1,57	7,00	8,12
	Ag	5,85	1,20	1,39	5,48	6,36
	Au	5,90	1,20	1,39	5,51	6,39
2	Be	24,2	1,93	2,23	14,14	16,41
	Mg	8,60	1,37	1,58	7,13	8,27
	Ca	4,60	1,11	1,28	4,68	5,43
	Sr	3,56	1,02	1,18	3,95	4,58
	Ba	3,20	0,98	1,13	3,65	4,24
	Zn	13,10	1,57	1,82	9,39	10,90
	Cd	9,28	1,40	1,62	7,46	8,66
3	Al	18,06	1,75	2,02	11,63	13,49
	Ga	15,30	1,65	1,91	10,35	12,01
	In	11,49	1,50	1,74	8,60	9,98
4	Pb	13,20	1,57	1,82	9,37	10,87
	Sn (trắng)	14,48	1,62	1,88	10,03	11,64



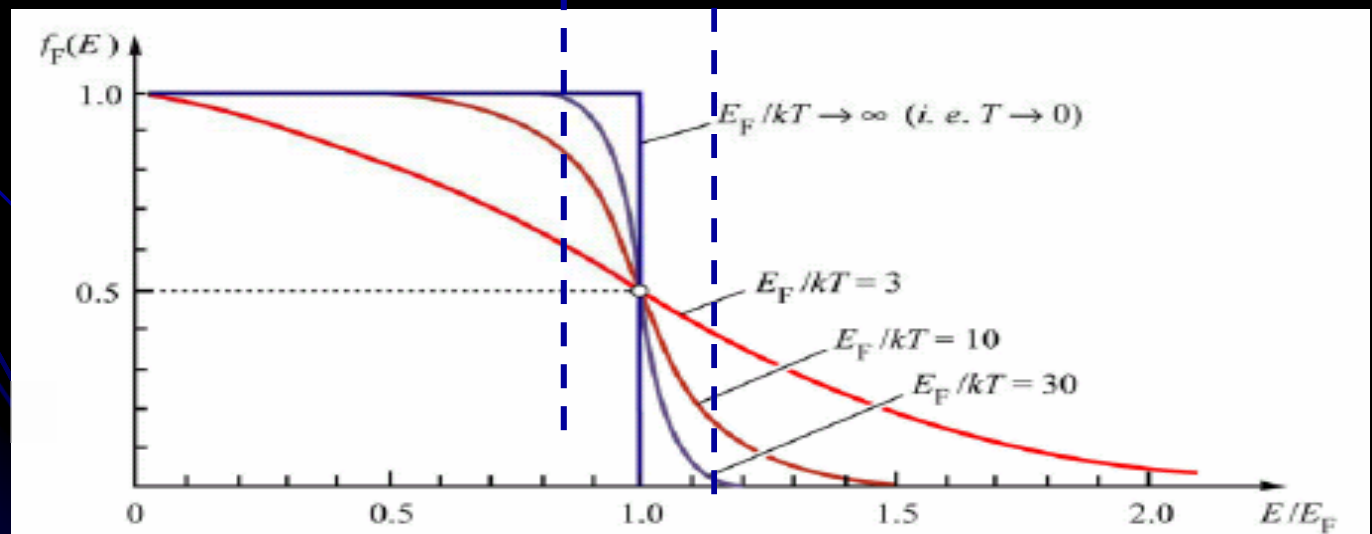
# III. ỨNG DỤNG LÝ THUYẾT SOMMERFELD

## 1. NHIỆT DUNG CỦA KHÍ NHIÊN TỬ

Theo lý thuyết của Sommerfeld các điện tử ô nhiễm gần mức Fermi đều tham gia vào quá trình trao đổi nhiệt.

Ở nhiệt độ  $T$ , do chuyển động nhiệt, một số điện tử ô nhiễm gần mức Fermi có thể nhảy lên mức năng lượng cao hơn thay đổi phân bố trạng thái của chúng.

→  $kT$  ←



Trong khoảng nhiệt độ mà năng lượng chuyển động nhiệt  $kT \ll E_F$ : các các điện tử trong dải năng lượng  $\Delta E = k_B T$  gần mức Fermi. Số điện tử trong dải nhỏ là

$$\Delta n = 2g(E_F).f(E).\Delta E$$

Trong đó  $g(E_F) = \frac{dN_E}{dE} = \frac{V}{4\pi^2} \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} E_F^{1/2} = \frac{3N}{2E_F}$

Với:  $N = 2 \frac{V}{6\pi^2} k_F^3$  và nên chọn giá trị lấy  $f(E) = 1$ .

$$\Rightarrow \Delta n = \frac{3}{2} N \left( \frac{T}{T_E} \right)$$

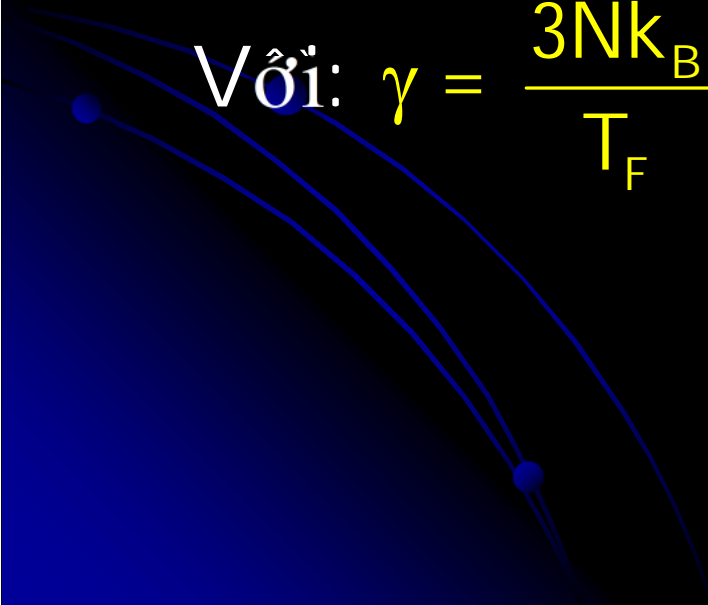
Nâng lượng makhí ñiẽn tũthũ ñũũc õũnhĩẽt ñũũT:

$$\Delta U = \Delta n \cdot k_B T = \frac{3}{2} N k_B T \left( \frac{T}{T_E} \right)$$

Do ñũũnhĩẽt dung:

$$C = \frac{\Delta U}{\Delta T} = \frac{3 N k_B}{T_F} T = \gamma T$$

Vũũi:  $\gamma = \frac{3 N k_B}{T_F}$



Nếu dùng hàm  $f(E)$  là hàm phân bố Fermi – Dirac thì :

$$\gamma = \frac{\pi^2 N_A k_B^2 Z}{2E_F}$$

- $N_A$  = số Avogadro và  $Z$  = hoá trị của kim loại.
- Vậy thuyết Sommerfeld cho kết quả phù hợp với thực nghiệm.
- Tuy nhiên trong một số trường hợp  $\gamma_{TN} \neq \gamma_{LT}$ . Nó là do niên tới khi chuyển năng trong tinh thể có cấu trúc khác với cấu trúc của niên tới tới do.

## 2. SỞ DẪN NHIỆT VÀ DẪN NHIỆN CỦA KHÍ NHIỆN TỐT TÍNH HỆ SỐ DẪN NHIỆT

Vì coi các nien tötöi do trong kim loai coi laø  
möt chat khí nên theo thuyet ñöng hoäc chat khí:

$$K = \frac{1}{3} C v \lambda$$

Vöi:  $C = \gamma T$ ;  $v = v_F$ ;  $\lambda = v_F \cdot \tau_F$

$$\Rightarrow K = \frac{1}{3} \gamma v_F^2 \tau_F T$$

Ônhiet ñöäphong, các kim loai sách thöông coi ñöädañ nhiät  
lön hôn các chat nien möt töø 10 ÷ 100 lañ.

$\Rightarrow$  các nien tötöi ñöng vai troätroä hôn trong quaätình dañ nhiät  
so vöi phonon

## TÍNH ĐIỆN DẪN

Mật độ dòng điện nhờ tính bất công thời:

$$\vec{j} = -e \int v(E) g(E) f_E dE = \sigma \vec{E}$$

$f(E)$  = hàm phân bố của điện tử khi có điện trường ngoài.

Tổng tử ta suy nhờ điện dẫn:

$$\sigma = \frac{ne^2 \tau_F}{m}$$

$\tau_F$  = thời gian bay tự do trung bình của điện tử ở mức Fermi.

## TÍNH SỐ LORENTZ

$$\frac{K}{\sigma T} = \frac{\pi^2}{3} \left( \frac{k_B}{e} \right)^2$$

- Kết quả của công thức này phụ hợp với nhiều kim loại trong khoảng nhiệt độ  $0^\circ\text{C} - 100^\circ\text{C}$ .
- Ở nhiệt độ thấp ( $T \ll \theta_D$ ):  $L$  giảm.
- Nguyên nhân là do có sự sai khác về thời gian hồi phục  $\tau$  giữa quá trình nhiệt và ãn.