



Physik der Kondensierten Materie 1

**Rudolf Gross
WS 2020/2021
Teil 16**

Vorlesungsstunde: 07.01.2021

Zusammenfassung: Teil 15, 22.12.2020/1

• **freies Elektronengas:** freie Elektronen in Potenzialtopf mit unendlich hohen Rändern

- (i) keine WW mit Atomrümpfen → freie Elektronen ($U = 0$)
- (ii) keine WW untereinander → keine Korrelationen

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}, \sigma) = E \Psi(\mathbf{r}, \sigma)$$

↑ Spin

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$$

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

- erlaubte Wellenvektoren
(aufgrund von Randbedingungen):

$$k_x = \frac{2\pi}{L_x} n_x, \quad k_y = \frac{2\pi}{L_y} n_y, \quad k_z = \frac{2\pi}{L_z} n_z \quad \text{mit } n_x, n_y, n_z = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$$

• **das freie Elektronengas bei $T = 0$**

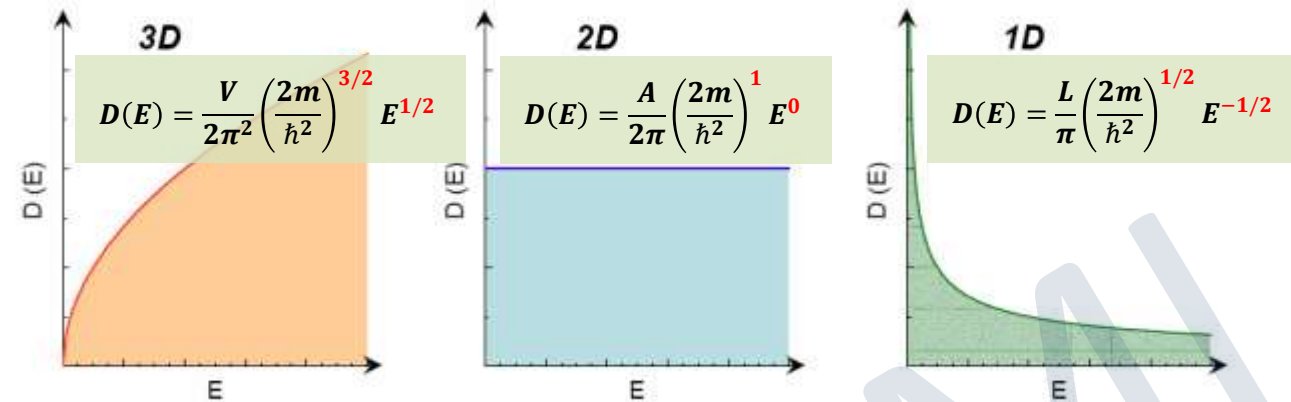
freie Elektronen in Potenzialtopf mit unendlich hohen Rändern

Zustandsdichte im k -Raum:

$$Z^{(3D)}(\mathbf{k}) = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \quad \text{(Spin)}$$

$$2 \int_{k(E)}^{k(E+\Delta E)} Z(\mathbf{k}) d^3k = \int_{E(k)}^{E(k)+\Delta E} D(E) dE$$

→ Zustandsdichte $D(E)$ im E -Raum



Fermi-Wellenvektor, -Energie, -Temperatur, -Geschwindigkeit, -Wellenlänge → bestimmt durch Teilchendichte $n = N/V$!!

$$\left. \begin{aligned} k_F^{(3D)} &= (3\pi^2 n^{(3D)})^{1/3} & E_F &= \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n^{(3D)})^{2/3} & T_F &= \frac{E_F}{k_B} & v_F &= \frac{\hbar k_F}{m} & \lambda_F &= \frac{2\pi}{k_F} \\ &\approx 10^{10} \text{ m}^{-1} & &\approx 4 \text{ eV} & &\approx 50\,000 \text{ K} & &\approx 10^6 \text{ m/s} & &\approx 1 \text{ \AA} \end{aligned} \right\} @ n^{(3D)} = 5 \times 10^{28} \text{ m}^{-3}$$

• Zustandsdichte bei der Fermi-Energie E_F (3D):

$$\text{mit } D(E_F) = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} E_F^{1/2} \text{ und } E_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3}$$

$$\Rightarrow \frac{D(E_F)}{V} = \frac{3}{2} \frac{n}{E_F}$$

Zusammenfassung: Teil 15, 22.12.2020/2

- Gesamtenergie aller Elektronen bei $T = 0$

$$E_{\text{ges}} = 2 \sum_{k \leq k_F} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad \rightarrow \quad \frac{E_{\text{ges}}}{N} = \frac{3}{5} E_F$$

- Druck, der von Elektronen ausgeübt wird: $p = - \left(\frac{\partial E_{\text{ges}}}{\partial V} \right)_{N=\text{const}} = -N \frac{3}{5} \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 N)^{2/3} \frac{\partial}{\partial V} \left(\frac{1}{V} \right)^{2/3} \Big|_{N=\text{const}}$

$$\rightarrow \quad p = \frac{2}{3} \frac{E_{\text{ges}}}{V} = \frac{2}{5} E_F n$$

- freies Elektronengas bei $T > 0$:

Quantenstatistik für Fermionen

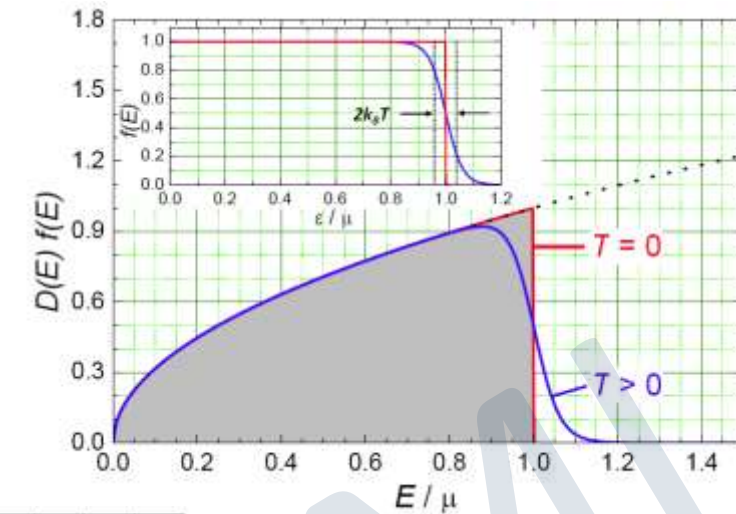
Fermi-Dirac-Verteilung

$$f(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - \mu}{k_B T}\right) + 1}$$

μ : chemisches Potenzial,
mittlere Energie pro zusätzlichem Teilchen

$E - \mu$: Teilchenenergie bezogen auf das
chemische Potenzial

$$f(E = \mu) = 1/2$$



- chemisches Potenzial

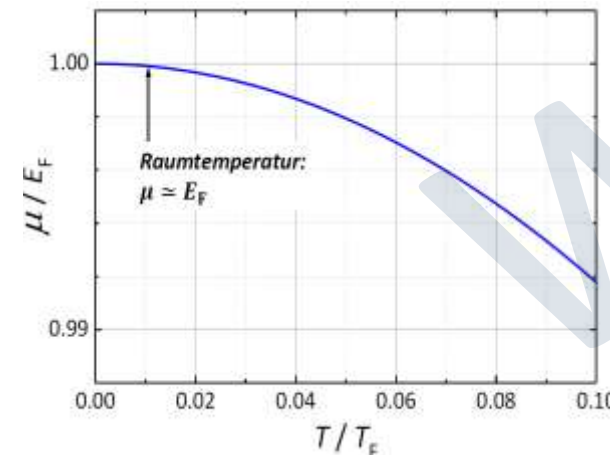
$$T = 0: \quad \mu(T = 0) = E_F$$

$$T > 0: \quad N = \int_0^\infty D(E) f(E, \mu, T) dE$$

Sommerfeld-Entwicklung:

$$\rightarrow \mu(T > 0) < E_F$$

$$\mu(T) = E_F \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{T}{T_F} \right)^2 \right]$$



$T/T_F \approx 10^{-2}$
für Metalle bei $T = 300 \text{ K}$

7.2 Spezifische Wärmekapazität

- Diskussion der Wärmekapazität des freien Elektronengases
 - ➔ *in welcher Temperaturerhöhung resultiert eine dem Elektronengas zugeführte Wärmemenge?*
- analoges Vorgehen wie bei Diskussion der Wärmekapazität des Kristallgitter
 - ➔ *Berechnung der inneren Energie $U(T)$ des Elektronengases*
 - ➔ *Ableitung der inneren Energie nach der Temperatur bei konstantem Volumen bzw. konstantem Druck*

$$C_V = \left. \frac{\partial U}{\partial T} \right|_V \quad C_p = \left. \frac{\partial U}{\partial T} \right|_p$$

WMI

7.2.1 Spezifische Wärmekapazität: Theorie

- Berechnung der inneren Energie $U(T)$ des freien Elektronengases

- **klassische Berechnung:**

- Elektronengas als klassisches Teilchengas (Drude-Modell, kein Pauli-Verbot)
- Gleichverteilungssatz → Beitrag $\frac{1}{2}k_B T$ pro kinetischem Freiheitsgrad zu innerer Energie

$$U = 2 \cdot 3 \cdot N \cdot \frac{1}{2} k_B T$$

$N = \text{Elektronenzahl}$

Spin Zahl der kinetischen Freiheitsgrade

$$C_V^{\text{klassisch}} = \left. \frac{\partial U}{\partial T} \right|_V = 3Nk_B \quad \text{Wärmekapazität}$$

$$c_V^{\text{klassisch}} = \frac{C_V^{\text{klassisch}}}{V} = 3nk_B \quad \text{spezifische Wärmekapazität}$$

➔ **weicht um Faktor 100 von gemessenem Wert ab !!**

Drude-Modell macht völlig falsche Vorhersage für Wärmekapazität

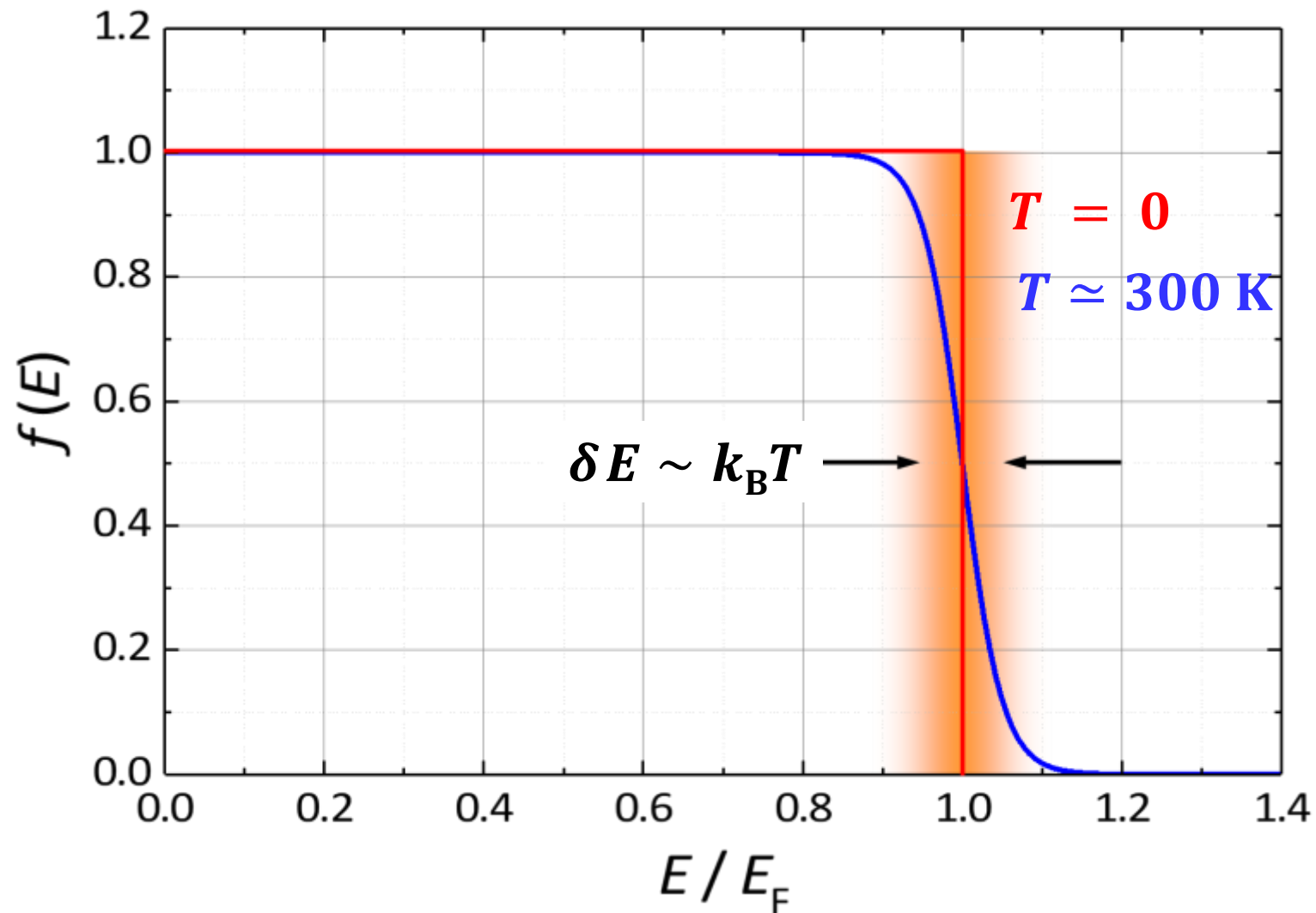
➔ **Ursache: klassische Betrachtung enthält kein Pauli-Verbot:**

alle Teilchen eines klassischen Teilchengases besitzen mittlere Energie der Größenordnung $k_B T$

7.2.1 Spezifische Wärmekapazität: Theorie

- Auswirkung des Pauli-Verbots:

Elektronen weit unterhalb von E_F können bei T -Erhöhung keine Energie der Größenordnung $k_B T$ aufnehmen, da alle erreichbaren Zustände mit Wahrscheinlichkeit $f(E) = 1$ besetzt sind



→ nur kleiner Anteil $\sim \frac{k_B T}{E_F} \simeq 0.01$ aller Elektronen kann bei Raumtemperatur zu Änderung der inneren Energie beitragen

typische Metalle:

$\mu \simeq E_F \sim 5 \text{ eV}$ bzw. $T_F \sim 60\,000 \text{ K}$

→ $\frac{E_F}{k_B T} \simeq 200$ @ 300 K

7.2.1 Spezifische Wärmekapazität: Theorie

- Berechnung der inneren Energie $U(T)$ des Elektronengases

- quantenmechanische Berechnung:

- Elektronengas als fermionisches Quantengas (Fermionen müssen Pauli-Verbot gehorchen)

$$U = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} E_{\mathbf{k}} f(E_{\mathbf{k}})$$

← Spin

$$E_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$f(E_{\mathbf{k}}) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E_{\mathbf{k}} - \mu}{k_B T}\right) + 1}$$

- wir führen Summation in Integration über:

$$U = \int_0^{\infty} dE E D(E) f(E) = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right) \int_0^{\infty} dE \frac{E^{3/2}}{\exp\left(\frac{E - \mu}{k_B T}\right) + 1}$$

$$D^{(3D)}(E) = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} E^{1/2}$$

(für beide Spinrichtungen)

- die Auswertung des Integrals ist leider etwas schwierig

- ➔ **Sommerfeld-Entwicklung** (siehe R. Gross, A. Marx, Festkörperphysik, 3. Aufl., Anhang C)

$$U(T) = U(T = 0) + \frac{\pi^2}{6} D(E_F) (k_B T)^2 + \dots$$

Plausibilitätsbetrachtung:

- T -Erhöhung: → Umbesetzung der Zustände
- Pauli-Prinzip: nur Elektronen in Energieintervall $k_B T$ um E_F können teilnehmen → $N_{\text{th}} \simeq D(E_F) k_B T$
- jedes Elektron trägt etwa $k_B T$ zu U bei
→ $U \simeq N_{\text{th}} k_B T = D(E_F) (k_B T)^2$

7.2.1 Spezifische Wärmekapazität: Theorie

- Wärmekapazität und spezifische Wärmekapazität

$$C_V^{\text{qm}} = \left. \frac{\partial U}{\partial T} \right|_V = \frac{\pi^2}{3} D(E_F) k_B^2 T$$

- mit Zustandsdichte $D^{(3D)}(E_F) = \frac{3}{2} V \frac{n}{E_F} = \frac{3}{2} \frac{N}{E_F}$ erhalten wir:

$$C_V^{\text{qm}} = \frac{C_V^{\text{qm}}}{V} = \frac{\pi^2}{3} \frac{D(E_F)}{V} k_B^2 T = \frac{\pi^2}{2} \frac{n k_B^2}{E_F} T = \gamma T$$

$$n = \frac{N}{V} = \text{Elektronendichte}$$

Sommerfeld-Koeffizient

$$\gamma = \frac{\pi^2}{2} \frac{n k_B^2}{E_F} = \frac{\pi^2}{3} \frac{D(E_F)}{V} k_B^2$$

Messung der spezifischen Wärmekapazität $c_V^{\text{qm}}(T)$ erlaubt Bestimmung der Zustandsdichte $D(E_F)$ und damit der Dichte und Masse der Elektronen

- Vergleich mit klassischem Ergebnis

$$C_V^{\text{qm}} = \frac{\pi^2}{2} \frac{n k_B^2}{E_F} T = \frac{\pi^2}{2} \frac{n k_B^2}{k_B T_F} T = \frac{\pi^2}{2 \cdot 3} 3 n k_B \frac{T}{T_F} \simeq c_V^{\text{klassisch}} \cdot \frac{T}{T_F}$$

Faktor $\frac{T}{T_F}$ gibt den Anteil der Elektronen an, die nicht Pauli-geblockt sind und zu spez. Wärmekapazität beitragen können

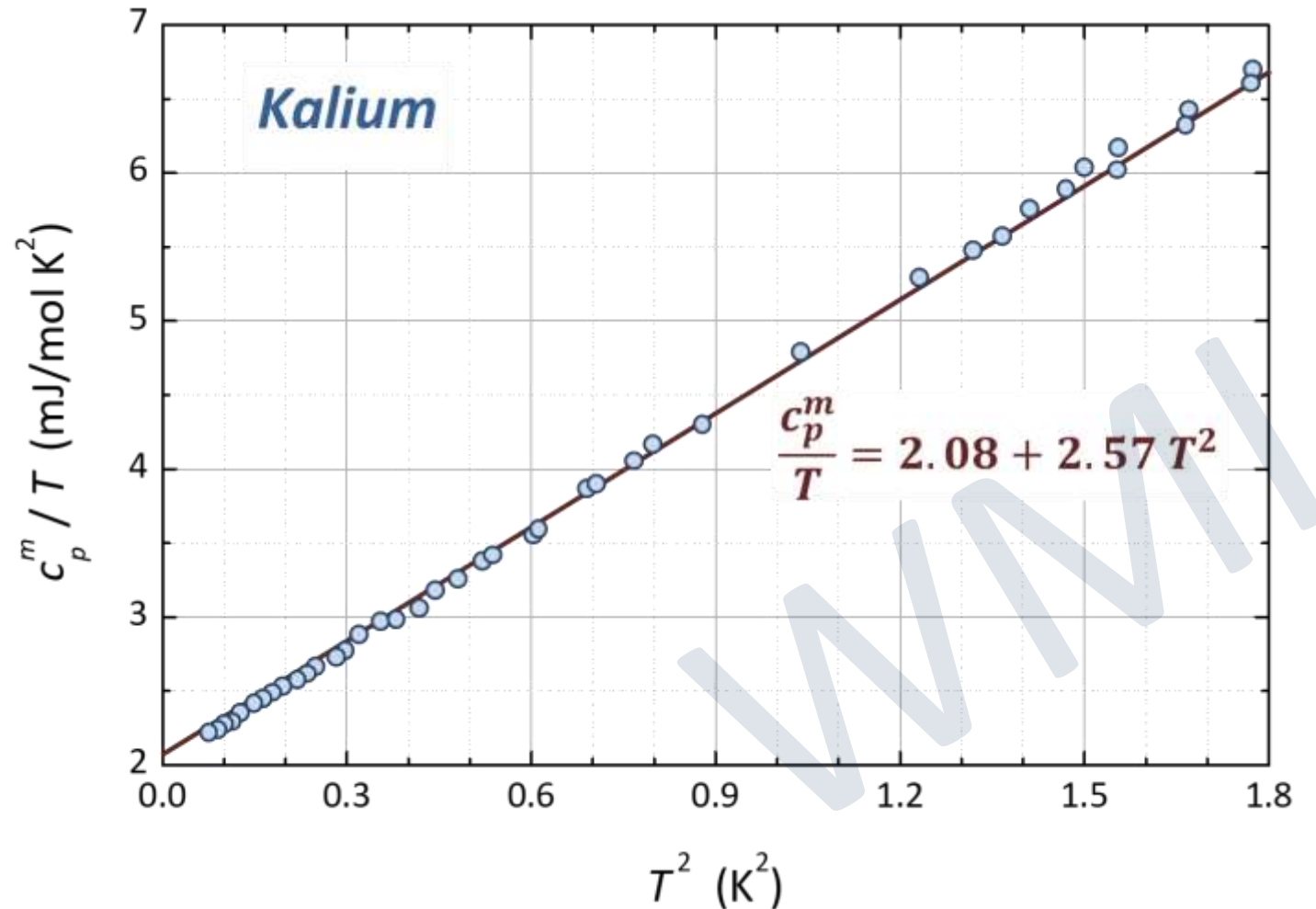
7.2.1 Spezifische Wärmekapazität: Experiment

- Messung der Wärmekapazität eines Metalls
 - wir messen immer die Wärmekapazität des Gitters und des Elektronengases zusammen
 - wie können wir beide Beiträge trennen? → unterschiedliche T-Abhängigkeit bei tiefen Temperaturen ausnutzen

$$C_V(T) = \gamma \cdot T + A \cdot T^3$$

Elektronengas Kristallgitter

- Auftragen von C_V/T gegen T^2 :
 - y-Achsenabschnitt liefert γ
 - Steigung liefert A



7.2.1 Spezifische Wärmekapazität: Experiment

- Vergleich des theoretisch erwarteten und des experimentell gemessenen Sommerfeld-Koeffizienten

Metall	γ_{exp} (10^{-3} J/mol K ²)	γ_{theor} (10^{-3} J/mol K ²)	$\gamma_{\text{exp}}/\gamma_{\text{theor}}$
Li	1.63	0.749	2.18
Na	1.38	1.094	1.26
K	2.08	1.668	1.25
Rb	2.41	1.911	1.26
Cs	3.20	2.238	1.43
Fe	4.98	0.498	10
Co	4.98	0.483	10.3
Ni	7.02	0.458	15.3
Cu	0.695	0.505	1.38
Ag	0.646	0.645	1.00
Au	0.729	0.642	1.14
Sn	1.78	1.41	1.26
Pb	2.98	1.509	1.97

große Abweichungen bei Übergangsmetallen

- 3d-Elektronen tragen stark zu $D(E_F)$ bei, sind aber relativ stark *lokalisiert*
- 3d-Elektronen können nur schlecht als freie Elektronen beschrieben werden
➔ Berücksichtigung durch "effektive" Masse m^*

Ursachen für effektive Masse

- Wechselwirkung der Elektronen mit Kristallgitter ➔ effektive Bandmasse
- Wechselwirkung mit den Phononen ➔ polaronische Masse
- Wechselwirkung der Elektronen untereinander

7.2.1 Spezifische Wärmekapazität: Experiment

- Vertiefungsthema: Schwere Fermionenmetalle

→ sehr hohe effektive Massen $m^*/m \simeq 100 - 1000$ in Elementen mit 4f- und 5f-Elektronen

- in Zustandsdichte $D(E_F) = \frac{3}{2} V \frac{n}{E_F} \propto m$ geht über
 $E_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n^{(3D)})^{2/3}$ die Masse der Elektronen ein
- $\gamma \propto D(E_F) \propto m^*$ wächst also proportional zu m^* an

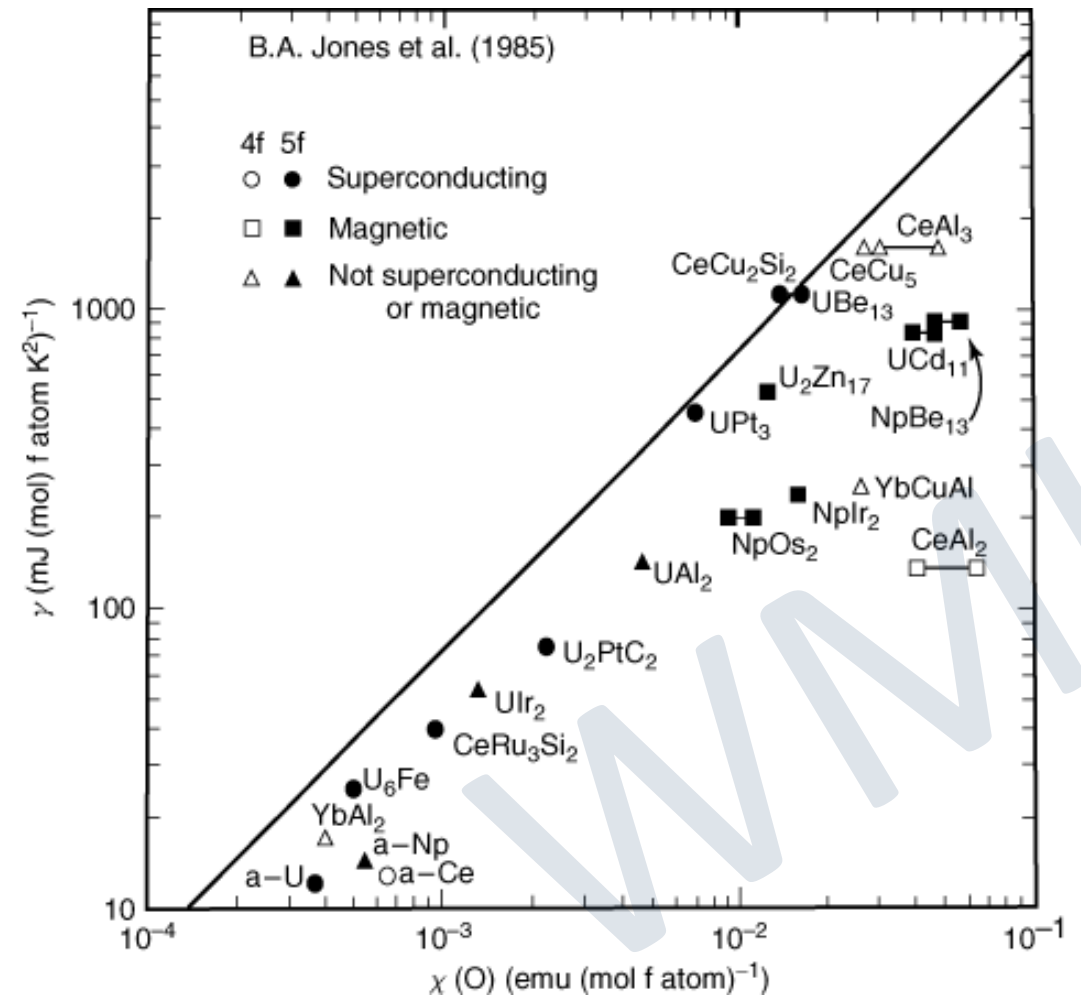
- Wilson-Verhältnis für freies Elektronengas

$$R_W = \frac{\gamma}{\chi_P} = \frac{\frac{\pi^2}{3} k_B^2 \frac{D(E_F)}{V}}{\mu_0 \mu_B^2 \frac{D(E_F)}{V}} = \frac{\pi^2}{3 \mu_0} \frac{k_B^2}{\mu_B^2} = const.$$

χ_P = Paulische Spinsuszeptibilität

μ_B = Bohrsches Magneton

- da $\gamma, \chi_P \propto D(E_F)$, nehmen beide mit steigender effektiver Masse zu, $R_W = \frac{\gamma}{\chi_P}$ bleibt aber etwa gleich



7.3 Transporteigenschaften

- Elektronen in Metallen transportieren Ladung, Wärme und Spin (Drehimpuls)
 - Elektrische Stromdichte J_q
 - Wärmestromdichte J_h
 - Spinstromdichte J_s

- wir diskutieren hier nur Ladungs- und Wärmetransport
 - elektrische Leitfähigkeit σ
 - Wärmeleitfähigkeit κ

- Physik von Spinströmen wurde erst in jüngerer Vergangenheit systematisch untersucht



7.3.1 Elektrische Leitfähigkeit

- Definition der elektrischen Leitfähigkeit

→ Proportionalitätskonstante zwischen Gradient des elektr. Potentials (Störung) und der elektrischen Stromdichte (lineare Antwort)

$$\mathbf{J}_q = -\sigma \nabla \phi_{el} = \sigma \mathbf{E}$$

analog zu Definition der Wärmeleitfähigkeit: $\mathbf{J}_h = -\kappa \nabla T$

(im Allgemeinen ist σ ein Tensor 2. Stufe)

- Transporttheorie: Drude-Modell (um 1900)

- **Elektronen = klassisches Teilchengas** mit mittlerer thermischer Geschwindigkeit $v_{th} = \sqrt{3k_B T/m}$
- Beschleunigung durch \mathbf{E} -Feld, Reibung durch Stöße nach mittlerer Streuzeit τ

Bewegungsgleichung $m \frac{d\mathbf{v}}{dt} + m \frac{\mathbf{v}}{\tau} = -e\mathbf{E}$

τ^{-1} = Impulsrelaxationsrate

stationärer Zustand: $d\mathbf{v}/dt = 0$ → mittlere Driftgeschwindigkeit $\langle \mathbf{v} \rangle = \mathbf{v}_D$ parallel zum \mathbf{E} -Feld

$$\mathbf{v}_D = -\frac{e\tau}{m} \mathbf{E} = -\mu \mathbf{E}$$

$\mu \equiv \frac{|\mathbf{v}_D|}{|\mathbf{E}|} = \frac{e\tau}{m}$ = Beweglichkeit

→ Driftgeschwindigkeit/ E -Feld

→ Elektronen bewegen sich entgegengesetzt zu \mathbf{E}

- elektrische Stromdichte

$$\mathbf{J}_q = -e n \mathbf{v}_D = \frac{ne^2\tau}{m} \mathbf{E} = \sigma \mathbf{E}$$

Ohmsches Gesetz

- elektrische Leitfähigkeit

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m} = ne\mu$$

elektrische Leitfähigkeit

7.3.1 Elektrische Leitfähigkeit

- falsche Schlüsse aus Drude-Modell

- aus gemessener Leitfähigkeit σ folgt mit bekannter Elektronendichte n die typische Streuzeit $\tau \approx 10^{-14}$ s
- mit $v_{\text{th}} \approx 10^5$ m/s folgt die mittlere freie Weglänge $\ell = v_{\text{th}}\tau \approx 1$ nm (entspricht etwa Atomabstand in Metall)

→ **Drude nahm deshalb fälschlicherweise an, dass Elektronen an den Gitteratomen gestreut werden !!**

WMI

7.3.1 Elektrische Leitfähigkeit

- **Transporttheorie: Sommerfeld-Modell**

- **Elektronen = fermionisches Quantengas** mit mittlerer Geschwindigkeit $v_F \gg v_{th}$
- Beschleunigung der Elektronen durch **E-Feld**, Reibung durch Stöße nach mittlerer Streuzeit τ

- **analoge Diskussion von Wärme- und Ladungstransport (1D-Modell)**

➤ **Wärmemenge:** $Q = \left(\frac{U}{V}\right) A v_x \tau$

➤ **Wärmestromdichte:** $J_{h,x} = \frac{Q}{A\tau} = \left[\left(\frac{U}{V}\right) A v_x \tau\right] \frac{1}{A\tau} = \left(\frac{U}{V}\right) v_x$

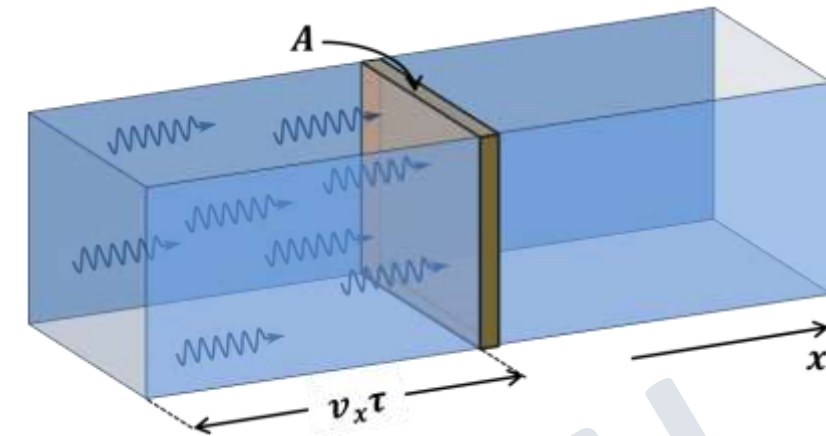
➤ **Ladungsmenge:** $Q = \left(\frac{N(-e)}{V}\right) A v_x \tau$

➤ **Ladungsstromdichte:** $J_{q,x} = \frac{Q}{A\tau} = \left[\left(\frac{N(-e)}{V}\right) A v_x \tau\right] \frac{1}{A\tau} = \left(\frac{N(-e)}{V}\right) v_x = -ne v_x$

$$v_x \rightarrow \langle v_x \rangle: \quad J_{q,x} = \left(\frac{N(-e)}{V}\right) \langle v_x \rangle = -en \langle v_x \rangle = -en \frac{\hbar}{m} \langle k_x \rangle = -en \frac{\hbar}{m} \frac{1}{N} \sum_{k_x, \sigma} k_x f_{k_x} = -\frac{e \hbar}{V m} \sum_{k_x, \sigma} k_x f_{k_x}$$

$J_{q,x}$ verschwindet im thermischen Gleichgewicht, da Besetzungszahlen für k_x und $-k_x$ gleich sind und $v_x(\mathbf{k}) = -v_x(-\mathbf{k})$

➔ **endliche Ladungsstromdichte nur in Nichtgleichgewichtssituation**



7.3.1 Elektrische Leitfähigkeit

- Nichtgleichgewicht durch elektrisches Feld

endliche Ladungsstromdichte für $\sum_{k_x, \sigma} k_x f_{k_x} = \underbrace{\sum_{k_x, \sigma} k_x f_{k_x}^0}_{\text{liefert keinen Beitrag zu } J_{q,x}} + \underbrace{\sum_{k_x, \sigma} k_x f_{k_x} - \sum_{k_x, \sigma} k_x f_{k_x}^0}_{\text{liefert Beitrag zu } J_{q,x}}$ $f_{k_x}^0 =$ Besetzungszahl im thermischen Gleichgewicht

- Ladungsstromdichte:

$$J_{q,x} = -\frac{1}{V} \frac{e\hbar}{m} \left[\sum_{k_x, \sigma} k_x f_{k_x} - \sum_{k_x, \sigma} k_x f_{k_x}^0 \right] = -\frac{1}{V} \frac{e\hbar}{m} N [\langle k_x \rangle - \langle k_x \rangle^0] = -n \frac{e\hbar}{m} [\langle k_x \rangle - \langle k_x \rangle^0] = -n \frac{e\hbar}{m} \delta k_x$$

- Frage:

- Wie kann sich mittlere Wellenzahl $\langle k_x \rangle$ in bestimmtem Raumgebiet ändern?
 - durch Kraftwirkung des elektrischen Felds auf Ladungsträgern
 - durch durch Streuprozesse der Ladungsträger

$$\frac{d\langle k_x \rangle}{dt} = \left. \frac{\partial \langle k_x \rangle}{\partial t} \right|_{\text{Kraft}} + \left. \frac{\partial \langle k_x \rangle}{\partial t} \right|_{\text{Streuung}}$$

Spezialfall der **Boltzmann-Transportgleichung**

wir werden im Folgenden nur **stationäre Prozesse** betrachten, für die $d\langle k_x \rangle / dt = 0$ gilt

7.3.1 Elektrische Leitfähigkeit

- Beschreibung der Änderung von $\langle k_x \rangle$ durch Streuung mit Relaxationszeitansatz

$$\left. \frac{\partial \langle k_x \rangle}{\partial t} \right|_{\text{Streuung}} = -\frac{\langle k_x \rangle - \langle k_x \rangle^0}{\tau} = -\frac{\delta k_x}{\tau}$$

- Beschreibungen der Änderung von $\langle k_x \rangle$ durch eine einzige (energieunabhängige) **Relaxationszeit τ**
- Änderungsrate ist proportional zur Abweichung vom Gleichgewicht

- Beschreibung der Änderung von $\langle k_x \rangle$ durch Kraftwirkung des elektrischen Felds

mit $F_x = -eE_x = m \frac{\partial \langle v_x \rangle}{\partial t} = \hbar \frac{\partial \langle k_x \rangle}{\partial t}$ erhalten wir

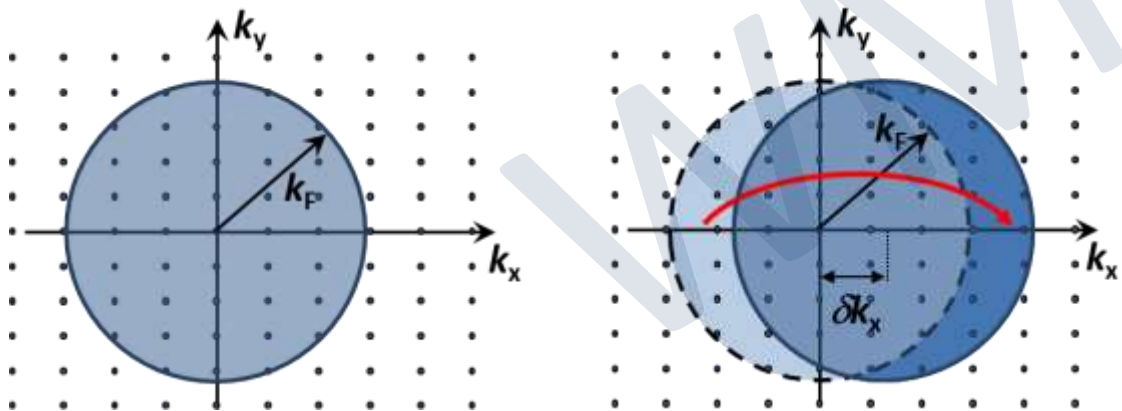
$$\left. \frac{\partial \langle k_x \rangle}{\partial t} \right|_{\text{Kraft}} = -\frac{e}{\hbar} E_x$$

- stationärer Fall:** $\frac{d \langle k_x \rangle}{dt} = 0 \Rightarrow \left. \frac{\partial \langle k_x \rangle}{\partial t} \right|_{\text{Kraft}} = -\left. \frac{\partial \langle k_x \rangle}{\partial t} \right|_{\text{Streuung}} \Rightarrow -\frac{e}{\hbar} E_x = \frac{\langle k_x \rangle - \langle k_x \rangle^0}{\tau}$

$$\langle k_x \rangle - \langle k_x \rangle^0 = \delta k_x = -\frac{e\tau}{\hbar} E_x$$

entspricht einer mittleren Verschiebung der gesamten Fermi-Kugel um

$$\delta k_x = -\frac{e\tau}{\hbar} E_x$$



7.3.1 Elektrische Leitfähigkeit

- Wie groß ist $\delta k_x = \langle k_x \rangle - \langle k_x \rangle^0$ im Vergleich zu k_F ?
 - typische elektrische Feldstärke in Metall: $E = 10 \text{ V/m}$ (Spannungsabfall von 10 V auf 1 m langem Kabel)
 - typische Streuzzeit $\tau \approx 10^{-14} \text{ s}$

$$\delta k_x = \langle k_x \rangle - \langle k_x \rangle^0 = -\frac{e\tau}{\hbar} E_x \approx 10^2 \text{ m}^{-1} \ll k_F \approx 10^{10} \text{ m}^{-1}$$

→ Verschiebung δk_x der Fermi-Kugel ist sehr viel kleiner als Radius k_F der Fermi-Kugel

- Wie groß ist die mittlere Driftgeschwindigkeit v_D im Vergleich zur Fermi-Geschwindigkeit v_F ?

$$\text{– es gilt } v_D = \frac{\hbar}{m} \delta k_x = \frac{\hbar}{m} \frac{\hbar k_F / m}{\hbar k_F / m} \delta k_x = v_F \frac{\delta k_x}{k_F} \ll v_F$$

- für obiges Zahlenbeispiel erhalten wir $v_D \approx 10^{-8} v_F \approx 10^{-2} \text{ m/s}$



7.3.1 Elektrische Leitfähigkeit

- elektrische Stromdichte im stationären Fall

$$J_{q,x} = -ne \frac{\hbar}{m} \delta k_x$$

$$\delta k_x = -\frac{e\tau}{\hbar} E_x$$

$$J_{q,x} = \frac{ne^2\tau}{m} E_x = ne\mu E_x = -ne v_D$$

Ohmsches Gesetz

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m} = ne\mu = \frac{ne^2\ell}{mv_F}$$

elektrische Leitfähigkeit

Interpretation:

$\sigma \propto ne$ (transportierte Ladungsmenge)

$\sigma \propto e/m$ (Beschleunigung in E-Feld)

$\sigma \propto \frac{\ell}{v_F} = \tau$ (proportional zu 1/Reibung)

erstaunlich:

- gleiches Ergebnis für elektrische Leitfähigkeit wie für Drude-Modell
- wie im Drude-Modell führt das elektrische Feld zu einer mittleren Driftgeschwindigkeit $v_D = -\mu E$
- **entscheidender Unterschied zu Drude-Modell:**
 - Elektronen bewegen sich nicht mit v_{th} sondern mit $v_F \gg v_{th}$
 - mittlere freie Weglänge ist $\ell = v_F\tau \gg v_{th}\tau \gg$ Atomabstand (typischerweise 10 - 100 nm in Metall @ 300 K)
 - Elektronen streuen nicht an Gitteratomen (genaue Diskussion der Streuprozesse folgt später)

7.3.1 Elektrische Leitfähigkeit

Drudes falsche Schlussfolgerungen (1)

Elektronen sind klassische Teilchen mit $v_{\text{th}} \approx \sqrt{\frac{3k_{\text{B}}T}{m}} \sim 10^5 \text{ m/s}$ @ 300 K

mittlere freie Weglänge $\ell = v_{\text{th}} \cdot \tau \approx 10^5 \frac{\text{m}}{\text{s}} \cdot 10^{-14} \text{ s} \approx 10^{-9} \text{ m} \sim \text{Atomabstand}$

→ Elektronen streuen an Gitteratomen !

(richtig: Elektronen streuen überhaupt nicht an perfektem Gitter)

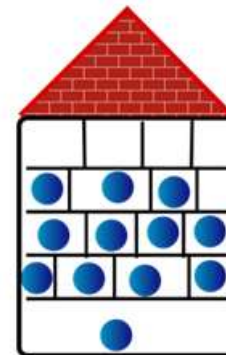
Drudes falsche Schlussfolgerungen (2)

Wärmekapazität $C_V = \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{\partial}{\partial T} \left(2 \cdot 3 \cdot N \cdot \frac{1}{2} k_{\text{B}} T \right) = 3Nk_{\text{B}}$

Experiment: $C_V \approx 3Nk_{\text{B}} \frac{T}{T_{\text{F}}}$

Ursache: nur kleiner Anteil $\frac{k_{\text{B}}T}{E_{\text{F}}} = \frac{T}{T_{\text{F}}}$ der Elektronen
kann Energie $\sim k_{\text{B}} T$ aufnehmen

Spin
kin. Freiheitsgrade



7.3.1 Elektrische Leitfähigkeit

- Temperaturabhängigkeit der elektrischen Leitfähigkeit

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m} = ne\mu = \frac{ne^2\ell}{mv_F}$$

→ Temperaturabhängigkeit resultiert aus T -Abhängigkeit der Streurrate

- in Metallen dominieren folgende Streuprozesse (genaue Diskussion der Streuprozesse folgt später)
 - *Streuung an Phononen*
 - *Streuung an Gitterdefekten und Verunreinigungen*
 - *Streuung an Probenoberfläche*
 -

- Matthiessen-Regel

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_1} + \frac{1}{\tau_2} + \frac{1}{\tau_3} + \dots$$

→ die Streuraten addieren sich, falls Streuprozesse voneinander unabhängig sind

7.3.1 Elektrische Leitfähigkeit

- Elektron-Phonon-Streuung

- hohe Temperaturen $T \gg \Theta_D$:

wegen $\tau_{\text{ph}}^{-1} \propto \langle n_{\text{ph}} \rangle \propto T/\Theta_D$ erhalten wir

$$\frac{1}{\sigma_{\text{ph}}} = \rho_{\text{ph}} \propto T$$

- tiefe Temperaturen $T \ll \Theta_D$:

wegen $\tau_{\text{ph}}^{-1} \propto \langle n_{\text{ph}} \rangle \propto T^3$ erwarten wir $\frac{1}{\sigma_{\text{ph}}} = \rho_{\text{ph}} \propto T^3$ (im Experiment wird aber $\frac{1}{\sigma_{\text{ph}}} = \rho_{\text{ph}} \propto T^5$ beobachtet)

zusätzlich zu berücksichtigen:

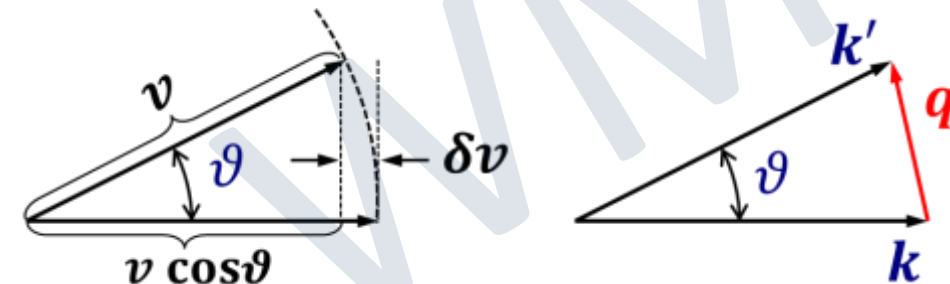
- wir müssen zusätzlichen Gewichtungsfaktor $(1 - \cos \vartheta)$ einführen, um die Streuprozesse, die geringe Richtungsänderung ϑ bewirken, weniger zu gewichten
- bei tiefen T sind nur Phononen mit kleinem q besetzt:

$$\frac{\delta v}{v} = 1 - \cos \vartheta \simeq \frac{1}{2} \vartheta^2 \propto q^2 = \omega_q^2 / v_s^2$$

mit $\omega_q \simeq k_B T / \hbar$ folgt

$$1 - \cos \vartheta \propto \omega_q^2 \propto T^2$$

$$\frac{1}{\sigma_{\text{ph}}} = \rho_{\text{ph}} \propto T^5$$



7.3.1 Elektrische Leitfähigkeit

- Elektron-Defekt/Verunreinigungsstreuung

- Streuprozesse sind temperaturunabhängig, da sich Dichte und Streuquerschnitt der Defekte nicht mit T ändern

$$\frac{1}{\sigma_{\text{def}}} = \rho_{\text{def}} \propto n_{\text{def}} S_{\text{def}} = \text{const}$$

- da Streuung an Phononen stark mit T abnimmt, bleibt bei tiefen T Widerstand durch Defektstreuung übrig

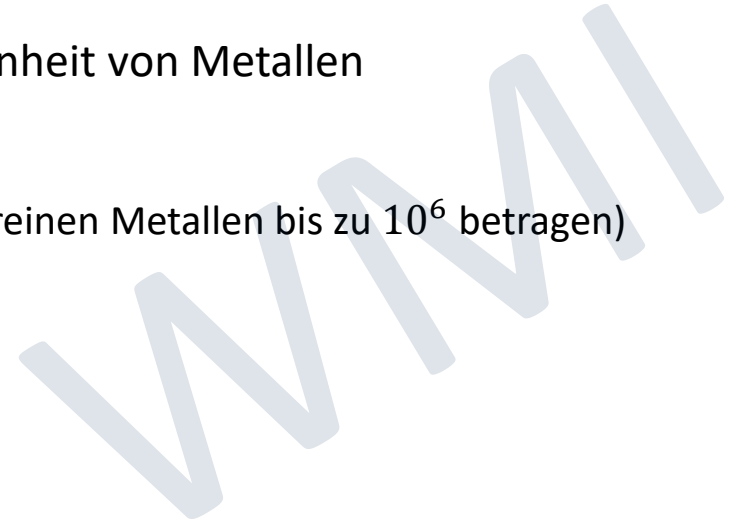
→ **Restwiderstand**

- Verwendung des Restwiderstandsverhältnisses zur Klassifizierung der Reinheit von Metallen

$$RRR = \frac{\rho(300\text{ K})}{\rho_{\text{def}}}$$

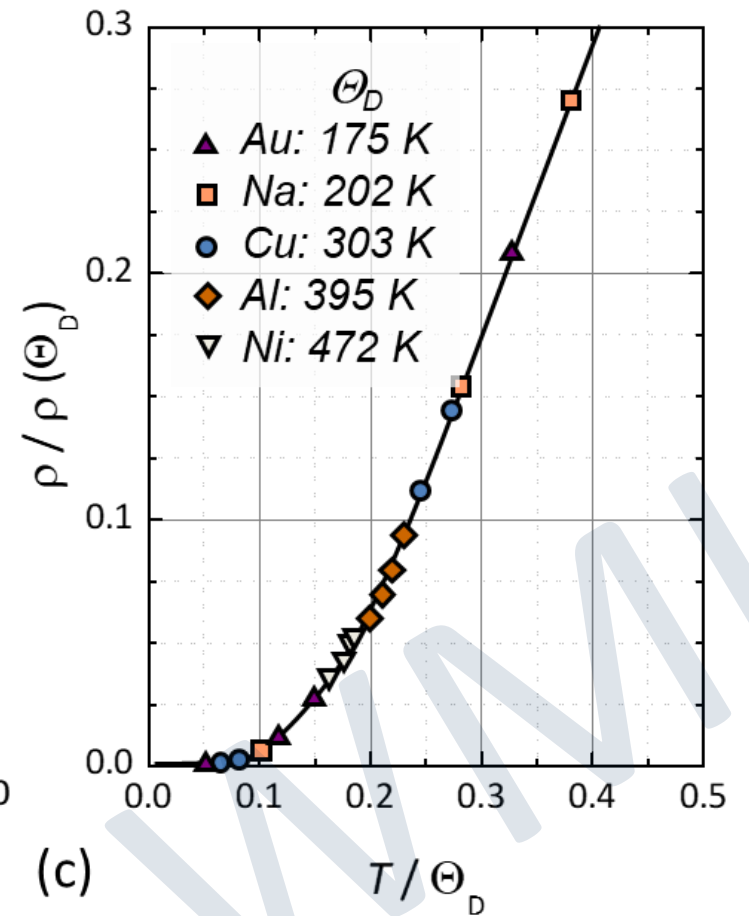
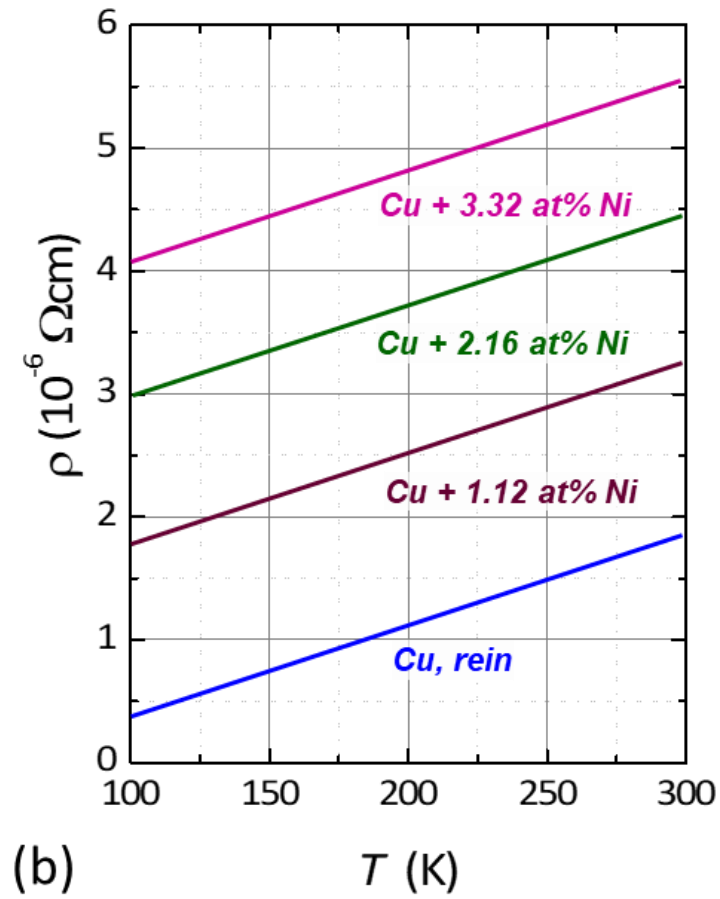
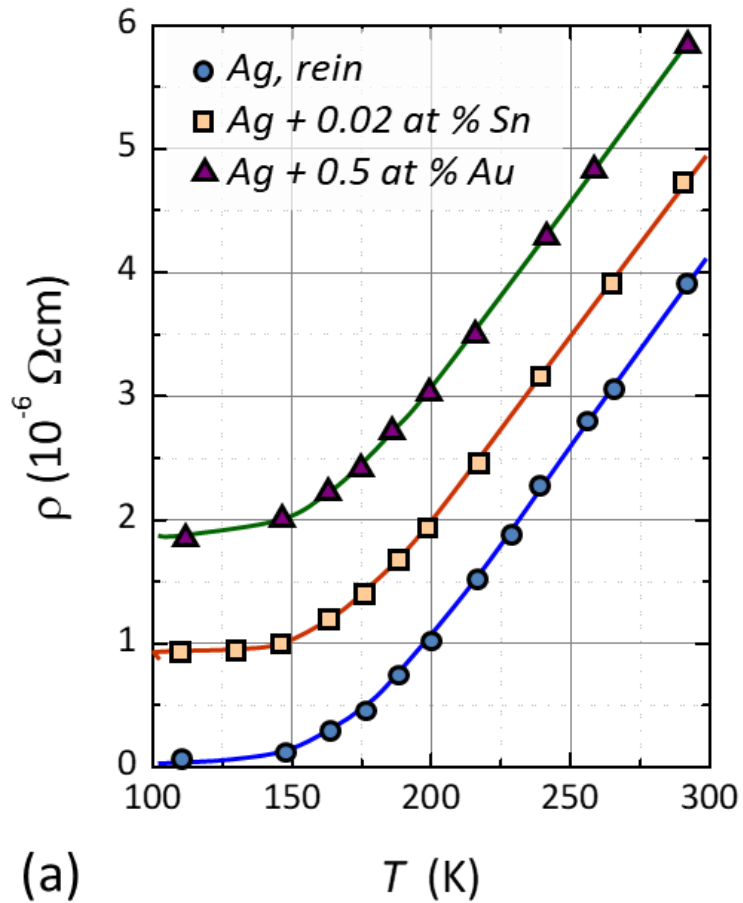
Residual Resistance Ratio

(kann in hochreinen Metallen bis zu 10^6 betragen)



7.3.1 Elektrische Leitfähigkeit

- Temperaturabhängigkeit der elektrischen Leitfähigkeit



• freies Elektronengas, spezifische Wärme:

- **klassisch**: Gleichverteilungssatz, N Elektronen \rightarrow pro kinetischem Freiheitsgrad Beitrag $\frac{1}{2} k_B T$

$$c_V^{\text{klassisch}} = \frac{\partial \langle U \rangle}{\partial T} \Big|_V = \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Spin}}}{2 \cdot 3} \cdot N \cdot \frac{1}{2} k_B = 3Nk_B \quad c_V^{\text{klassisch}} = \frac{C_V^{\text{klassisch}}}{V} = 3nk_B$$

um Faktor $T/T_F \approx 100$ zu groß !!

- **quantenmechanisch**: $U = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} E(\mathbf{k}) f(E_{\mathbf{k}}) = \int_0^{\infty} dE E D(E) f(E)$

- T -Erhöhung \rightarrow Umbesetzung der Zustände

- wegen Pauli-Prinzip kann nur Anteil der Elektronen in Energieintervall $k_B T$ um E_F teilnehmen $\rightarrow N_{\text{th}} \approx D(E_F) k_B T$

- jedes Elektron trägt etwa $k_B T$ zu U bei

$$\left. \begin{array}{l} U \approx U(T=0) + D(E_F)(k_B T)^2 \\ c_V \approx \frac{D(E_F)}{V} 2k_B^2 T = 3nk_B^2 \frac{T}{E_F} = 3nk_B \frac{T}{T_F} \end{array} \right\} \begin{array}{l} D(E_F) = \frac{3N}{2E_F} = \frac{3nV}{2E_F} \end{array}$$

- genaue Rechnung (Sommerfeld-Entwicklung)

$$c_V^{\text{qm}} = \frac{\pi^2}{3} k_B^2 \frac{D(E_F)}{V} T = \frac{\pi^2}{2} nk_B \frac{T}{T_F} = \gamma \cdot T \approx c_V^{\text{klassisch}} \frac{T}{T_F}$$

$$\gamma = \frac{\pi^2}{3} k_B^2 \frac{D(E_F)}{V} = \frac{\pi^2}{2} \frac{nk_B^2}{E_F} \quad \text{Sommerfeld-Koeffizient}$$

• freies Elektronengas, elektrische Leitfähigkeit:

$$\mathbf{J}_q = \sigma \mathbf{E} = -\sigma \nabla \phi_{\text{el}}$$

Drude-Modell:

(klassisches Teilchengas)

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} + \frac{m}{\tau} \mathbf{v} = -e\mathbf{E}$$

τ = Impulsrelaxationszeit

stationärer Zustand ($\frac{d\mathbf{v}}{dt} = 0$):

$$\mathbf{v}_D = -\frac{e\tau}{m} \mathbf{E} = -\mu \mathbf{E}$$

$\mathbf{v}_D = \langle \mathbf{v} \rangle$ = mittlere Drift-Geschwindigkeit aller Elektronen

$$\mu = |\mathbf{v}_D|/|\mathbf{E}| \quad (\text{Beweglichkeit})$$

elektrische Stromdichte:

$$\mathbf{J}_q = -en\mathbf{v}_D = \frac{ne^2\tau}{m} \mathbf{E} = ne\mu \mathbf{E}$$

$$\sigma = ne^2\tau/m$$

(elektrische Leitfähigkeit)

Zusammenfassung: Teil 16, 07.01.2021/2

Sommerfeld-Modell:
(fermionsches Quantengas)

$$J_q = \left(\frac{N(-e)}{V} \right) \langle \mathbf{v} \rangle = -en \langle \mathbf{v} \rangle = -en \frac{\hbar}{m} \langle \mathbf{k} \rangle = -en \frac{\hbar}{m} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} f_{\mathbf{k}} \mathbf{k} = -en \frac{\hbar}{m} \delta \mathbf{k}$$

thermisches Gleichgewicht: $\sum_{\mathbf{k}, \sigma} f_{\mathbf{k}} \mathbf{k} = \mathbf{0}$

→ $J_q \neq \mathbf{0}$ nur für $\sum_{\mathbf{k}, \sigma} f_{\mathbf{k}} \mathbf{k} \neq \mathbf{0}$

$$J_q = -en \frac{\hbar}{m} \delta \mathbf{k}$$

$\delta \mathbf{k}$ = Abweichung vom therm. Gleichgewicht

Berechnung der Änderung von $\delta \mathbf{k}$ durch äußere Kräfte (**E**-Feld) und Relaxationsprozesse (Streuung)

$$\frac{d\langle \mathbf{k} \rangle}{dt} = \left. \frac{\partial \langle \mathbf{k} \rangle}{\partial t} \right|_{\text{Kraft}} + \left. \frac{\partial \langle \mathbf{k} \rangle}{\partial t} \right|_{\text{Streuung}} = 0 \quad (\text{stationärer Zustand})$$

$$\left. \frac{\partial \langle \mathbf{k} \rangle}{\partial t} \right|_{\text{Kraft}} = -\frac{e}{\hbar} \mathbf{E} \quad \left. \frac{\partial \langle \mathbf{k} \rangle}{\partial t} \right|_{\text{Streuung}} = -\frac{\delta \mathbf{k}}{\tau} \quad \text{Relaxationszeitansatz}$$

$$\delta \mathbf{k} = -\frac{e\mathbf{E}}{\hbar} \tau$$

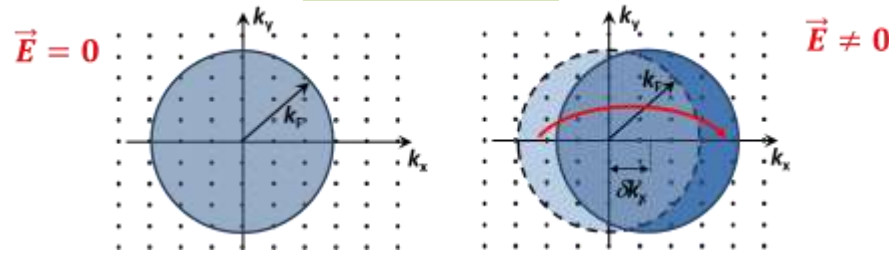
$$J_q = -en \frac{\hbar}{m} \delta \mathbf{k}$$

$$J_q = \frac{ne^2\tau}{m} \mathbf{E} = ne\mu \mathbf{E} \quad \text{Ohmsches Gesetz}$$

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m} = \frac{ne^2\ell}{mv_F} \quad \text{elektrische Leitfähigkeit}$$

$$\text{Beweglichkeit: } \mu = \frac{|\mathbf{v}_D|}{|\mathbf{E}|} = \frac{e\tau}{m}$$

mittlere freie Weglänge: $\ell = v_F \tau$



typische Feldstärke in Kupferkabel: $E \sim 10 \text{ V/m}$

typische Streuzeit: $\tau \sim 10^{-14} \text{ s}$

$$\Rightarrow |\delta \mathbf{k}| = \frac{eE\tau}{\hbar} \sim 10^2 \text{ m}^{-1} \sim 10^{-9} k_F$$

• freies Elektronengas, T-Abhängigkeit der elektrischen Leitfähigkeit:

- Streuung an Phononen
- Streuung an Verunreinigungen
- Streuung an Probenoberfläche
-

- hohe $T, T \gg \Theta_D$: $\rho \propto n_{\text{ph}} \propto T$ (Streuung an Phononen)

- tiefe $T, T \ll \Theta_D$: $\rho \propto T^5$ (Streuung an Phononen)

- $T \rightarrow 0$: $\rho \rightarrow \text{const.}$ (Streuung an Defekten, Probenoberfläche, ...)

Matthiessen-Regel: $\tau^{-1} = \tau_1^{-1} + \tau_2^{-1} + \tau_3^{-1} + \dots$ (Addition der Streuraten)