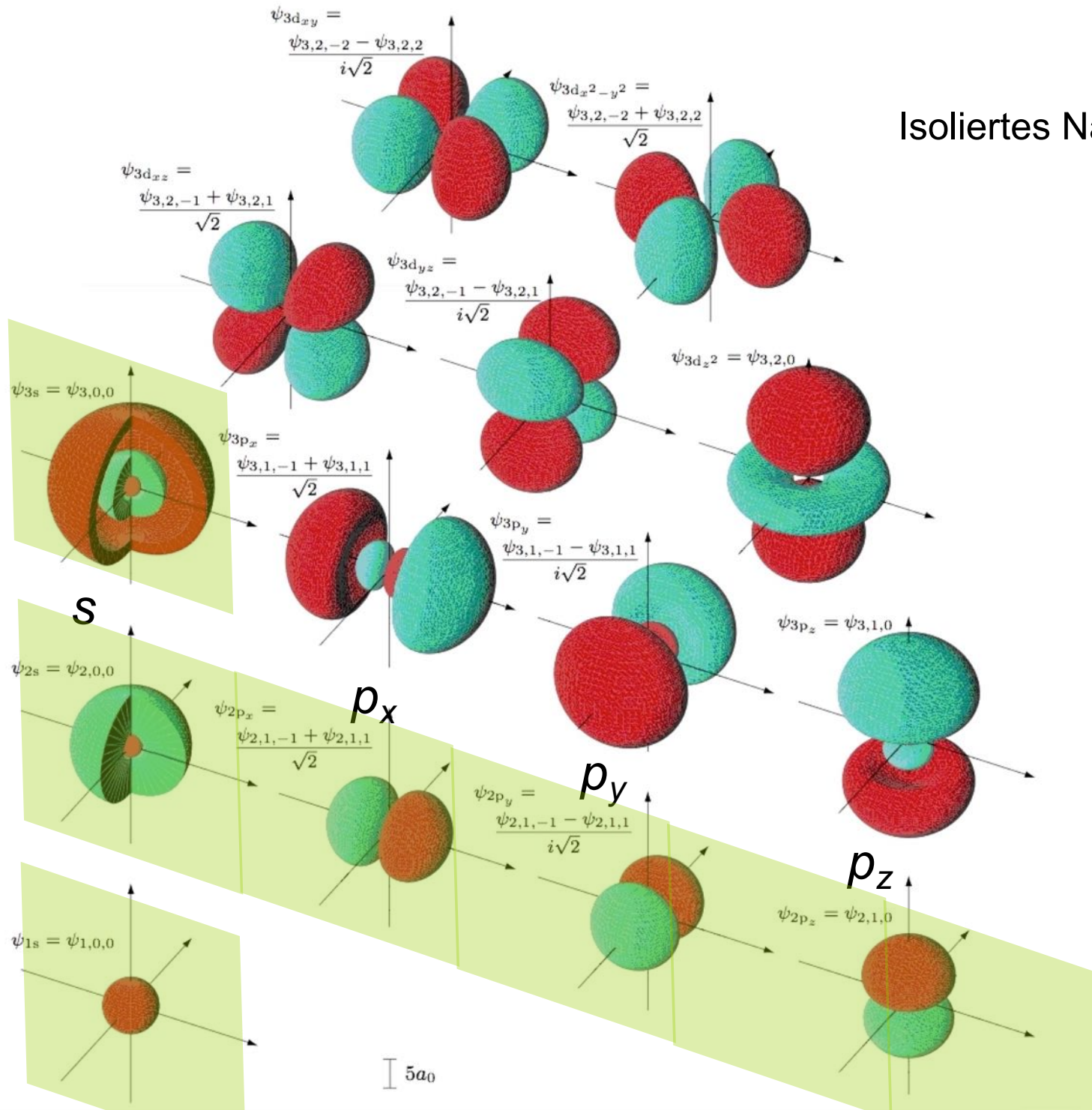
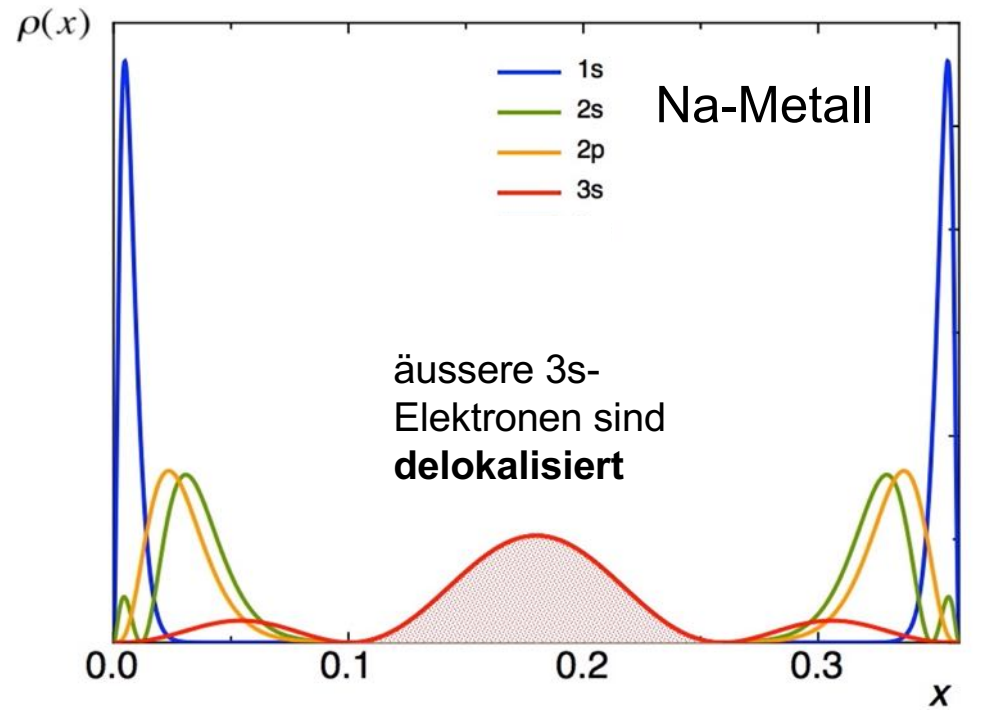
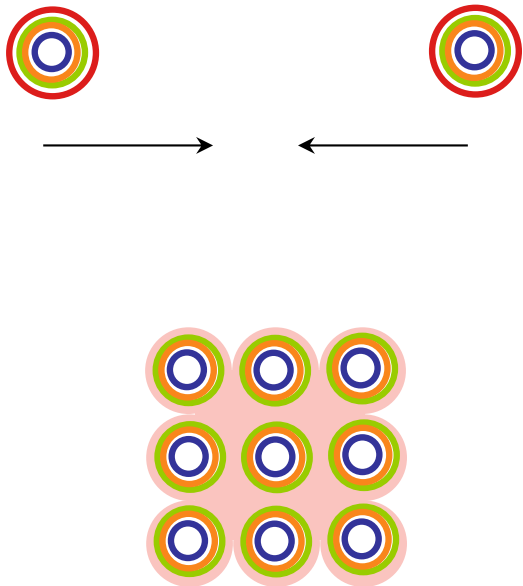
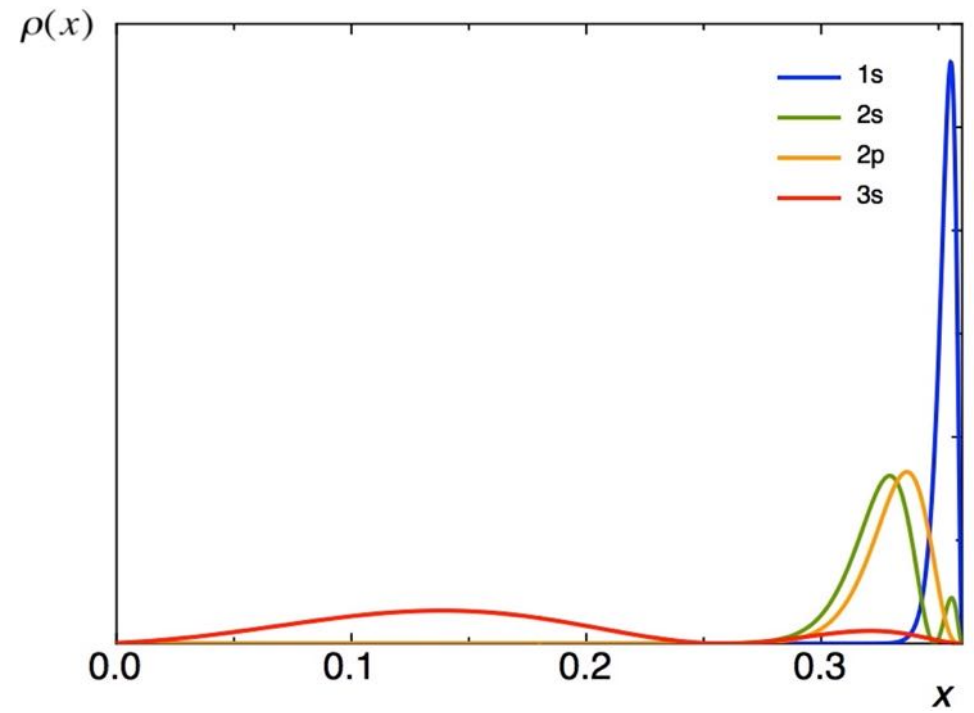
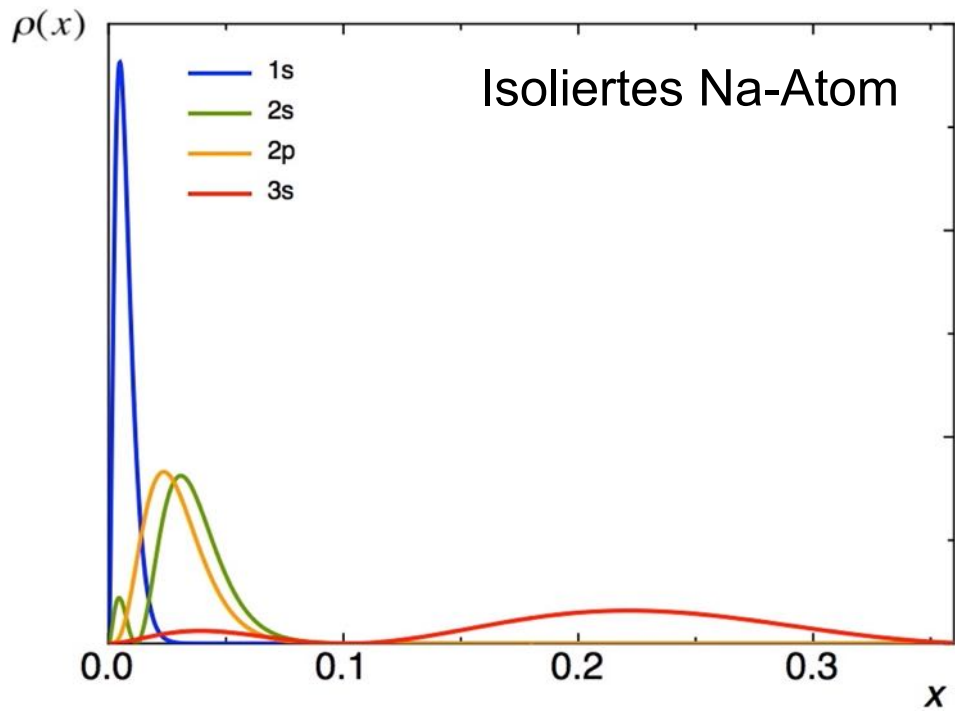


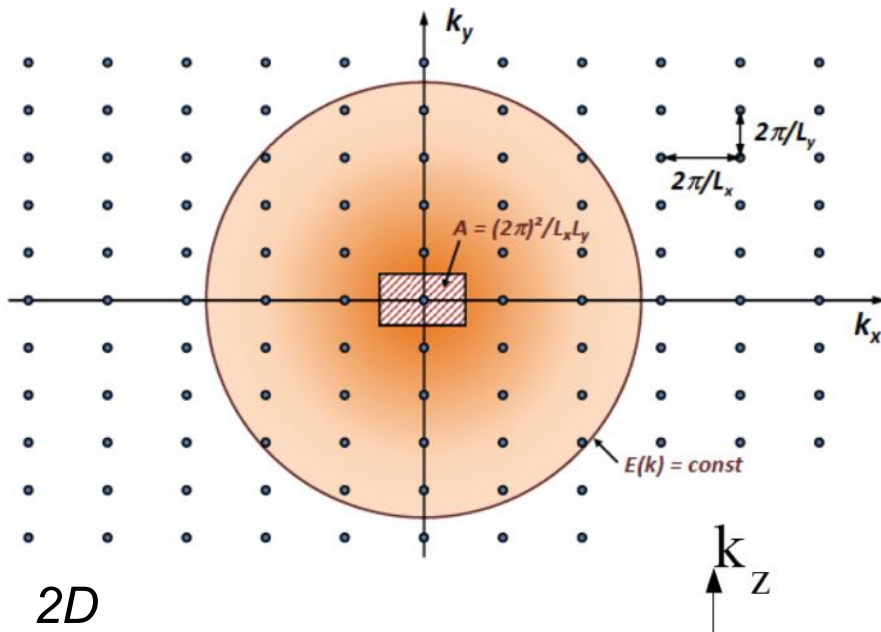


VI. Elektronenzustände im Kristall

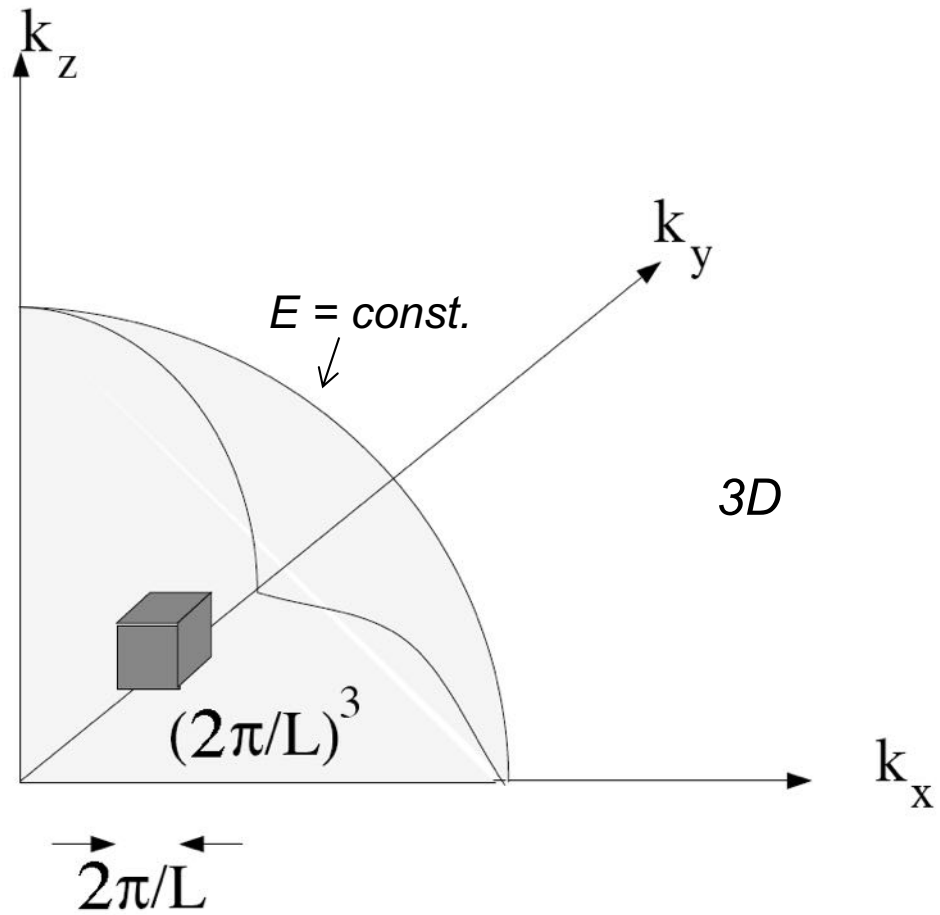
Isoliertes Na-Atom







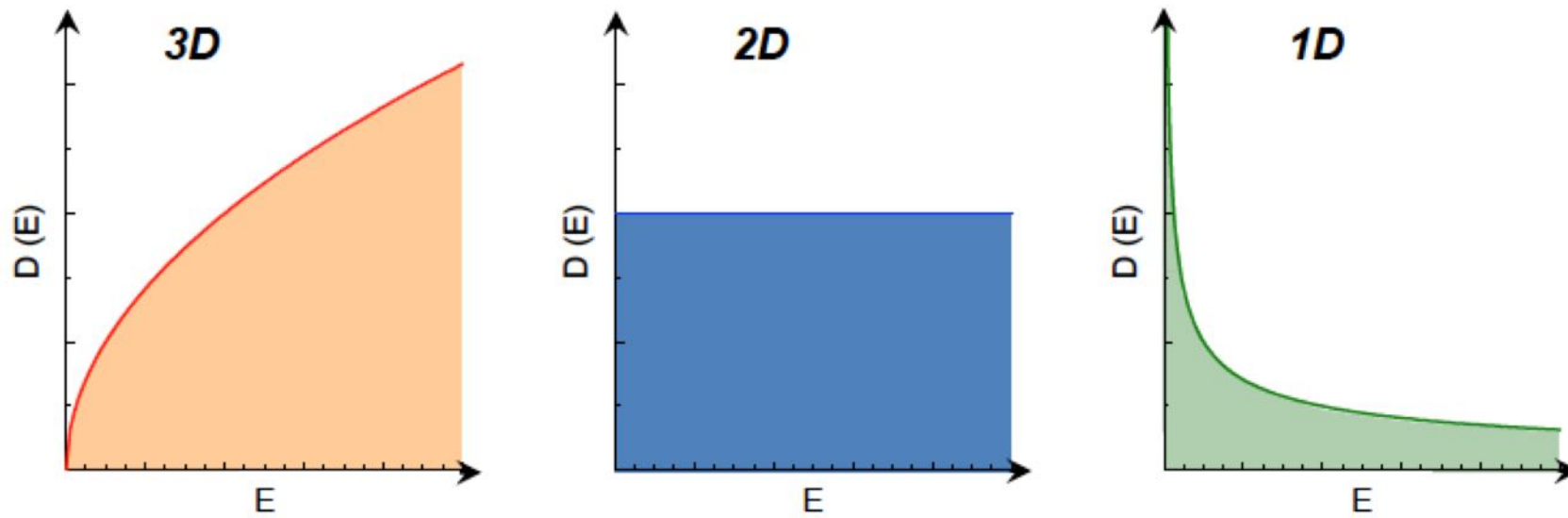
k -Raum mit möglichen
Elektronenzuständen



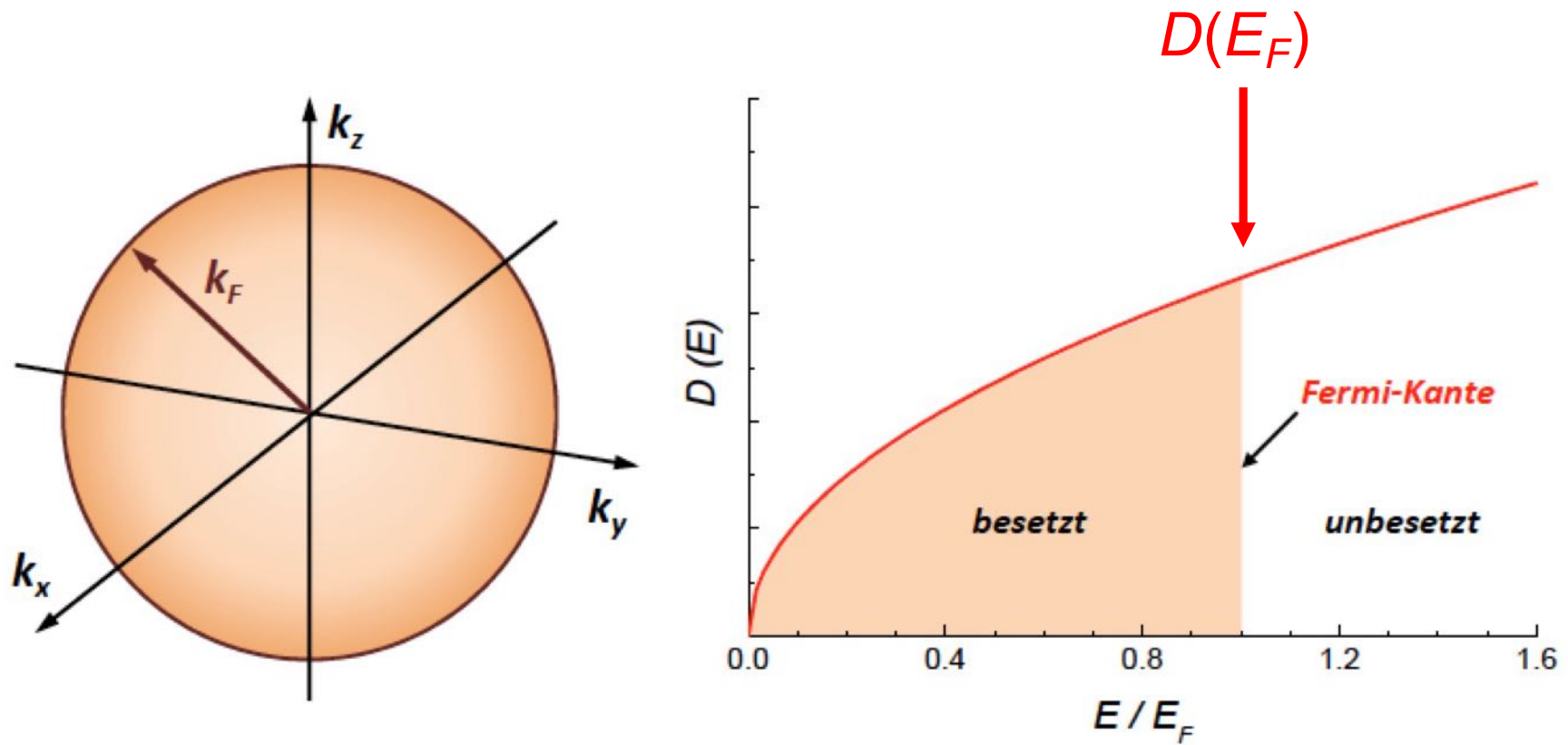
Berechnete Parameter der Fermiflächen für freie Elektronen in Metallen bei Zimmertemperatur
(Nur für Na, K, Rb, Cs bei 5 K und für Li bei 78 K)

Wertigkeit	Metall	Elektronen- konzentration in cm^{-3}	Radius- parameter ^a r_s	Fermi- Wellenvektor in cm^{-1}	Fermi- geschwindigkeit in cm s^{-1}	Fermi- energie in eV	Fermitemperatur $T_F = \epsilon_F/k_B$ in K
1	Li	$4,70 \times 10^{22}$	3,25	$1,11 \times 10^8$	$1,29 \times 10^8$	4,72	$5,48 \times 10^4$
	Na	2,65	3,93	0,92	1,07	3,23	3,75
	K	1,40	4,86	0,75	0,86	2,12	2,46
	Rb	1,15	5,20	0,70	0,81	1,85	2,15
	Cs	0,91	5,63	0,64	0,75	1,58	1,83
	Cu	8,45	2,67	1,36	1,57	7,00	8,12
	Ag	5,85	3,02	1,20	1,39	5,48	6,36
	Au	5,90	3,01	1,20	1,39	5,51	6,39
2	Be	24,2	1,88	1,93	2,23	14,14	16,41
	Mg	8,60	2,65	1,37	1,58	7,13	8,27
	Ca	4,60	3,27	1,11	1,28	4,68	5,43
	Sr	3,56	3,56	1,02	1,18	3,95	4,58
	Ba	3,20	3,69	0,98	1,13	3,65	4,24
	Zn	13,10	2,31	1,57	1,82	9,39	10,90
	Cd	9,28	2,59	1,40	1,62	7,46	8,66
3	Al	18,06	2,07	1,75	2,02	11,63	13,49
	Ga	15,30	2,19	1,65	1,91	10,35	12,01
	In	11,49	2,41	1,50	1,74	8,60	9,98
4	Pb	13,20	2,30	1,57	1,82	9,37	10,87
	Sn(ω)	14,48	2,23	1,62	1,88	10,03	11,64

^a Der dimensionslose Radiusparameter ist definiert als $r_s = r_0/a_H$; dabei ist a_H der erste Bohrsche Radius und r_0 der Radius einer Kugel, die ein Elektron enthält.



Zustandsdichte für ein 1D-, 2D- und 3D-Elektronengas.

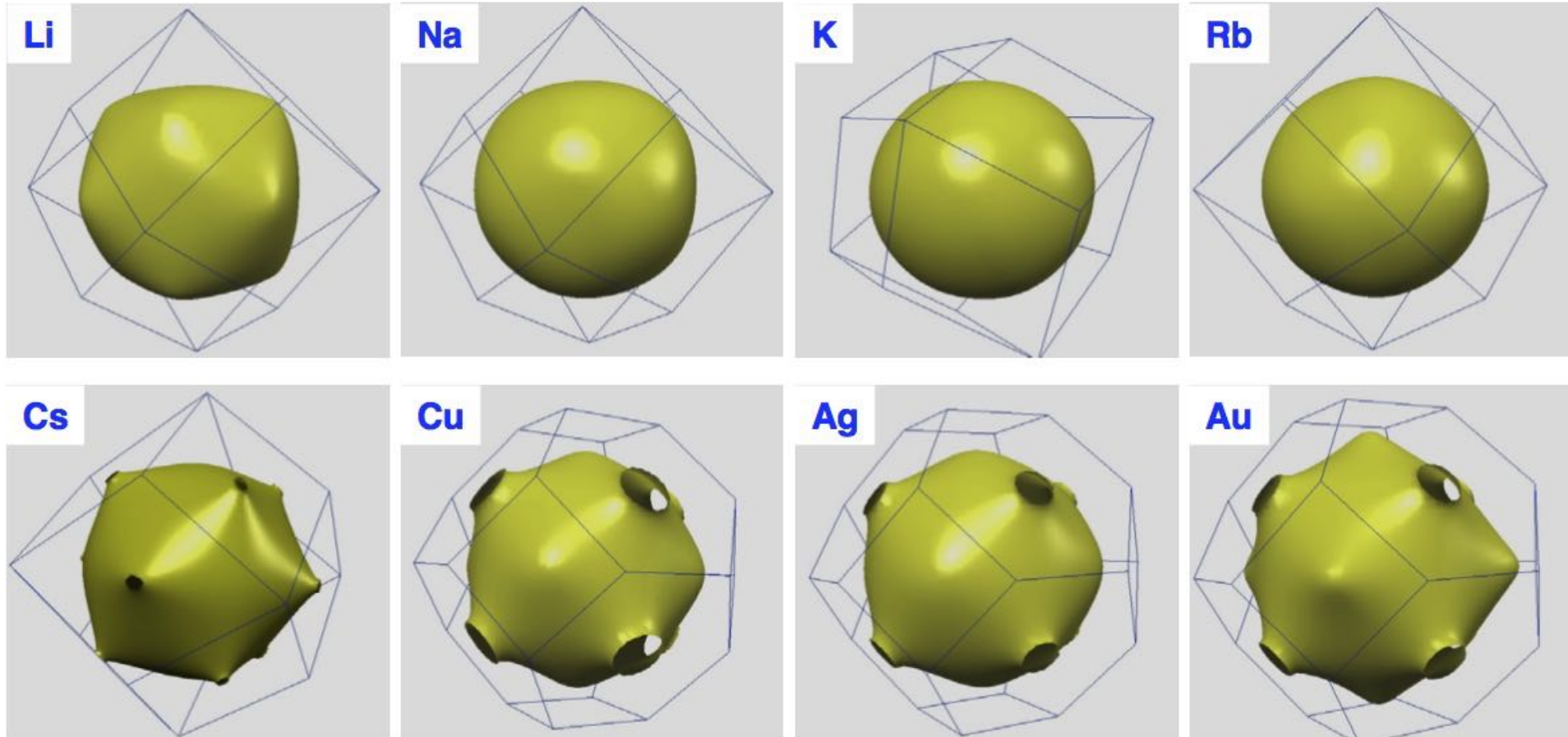


Fermi-Kugel und Zustandsdichte für ein 3D-Elektronengas bei $T = 0$. Die besetzten und unbesetzten Zustände sind durch eine scharfe Fermi-Kante getrennt.

Flächen konstanter Energie

3D

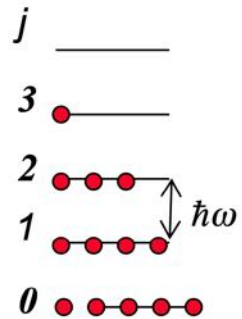
periodisches Potential $V(r) \neq 0$



Fermi-Flächen von einfachen Metallen. Die Alkali-Metalle kristallisieren in einem bcc-Gitter, Cu, Ag und Au in einem fcc-Gitter

Eine Eigenschwingung mit ω kann, je nach Temperatur T , mit mehr oder weniger Phononen besetzt sein. Die Verteilung der quantisierten Energien $E_j = j\hbar\omega$ ist durch den Boltzmann-Faktor gegeben:

$$1 + x + x^2 + x^3 \dots = \frac{1}{1-x}, \quad x = \exp\left(\frac{-\hbar\omega}{k_B T}\right)$$



$$w(E_j) = \frac{\exp(-j\hbar\omega / k_B T)}{\sum_{j=0}^{\infty} \exp(-j\hbar\omega / k_B T)} = \exp(-j\hbar\omega / k_B T) (1 - \exp(-\hbar\omega / k_B T))$$

Mittlere Energie der Eigenschwingung ω

$$\bar{E}_\omega = \sum_{j=0}^{\infty} w(E_j) E_j = \frac{\hbar\omega}{\exp(\hbar\omega / k_B T) - 1}$$

$$1 + 2x + 3x^2 + 3x^3 \dots = \frac{x}{(1-x)^2}$$

Besetzungszahl

$$n(\omega) = \bar{E}_\omega / \hbar\omega = \frac{1}{\exp(\hbar\omega / k_B T) - 1}$$

Bose-Einstein Statistik **für Bosonen**

Totale innere Energie *aller* Eigenschwingungen ω

$$U(T) = \int_0^{\infty} \bar{E}_\omega \rho(\omega) d\omega$$

$$C_v = \frac{\partial U}{\partial T}$$

**Klassisch
(Boltzmann):**

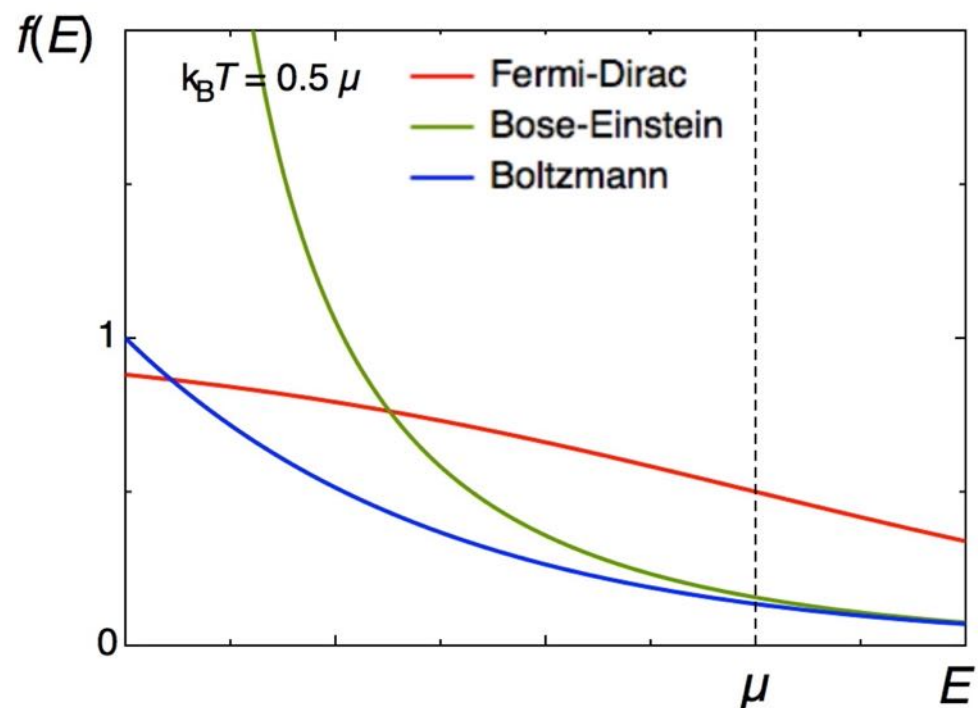
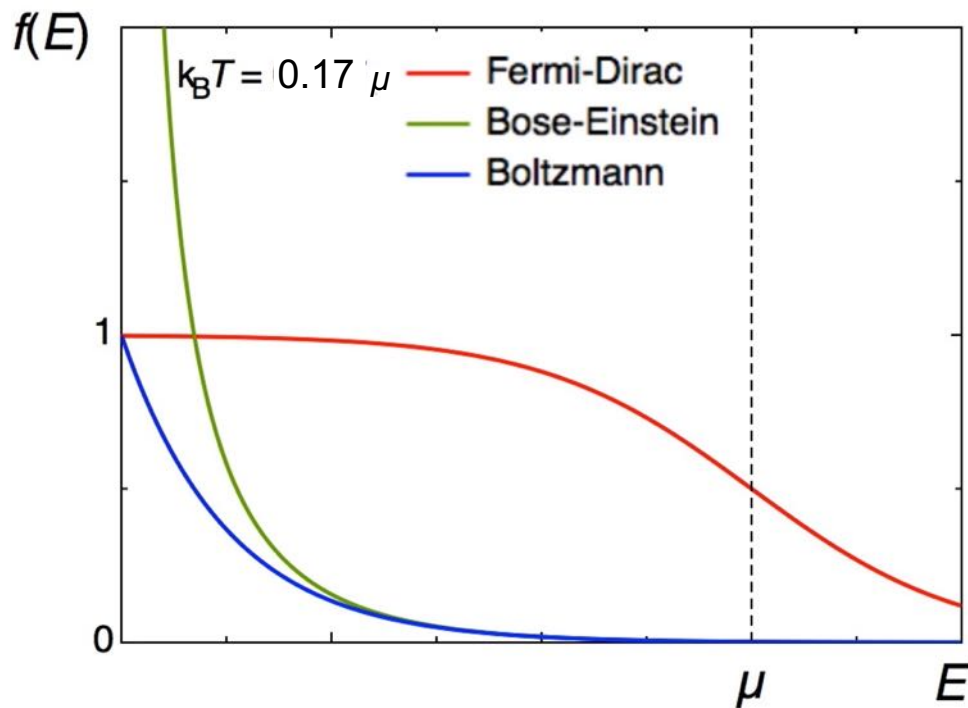
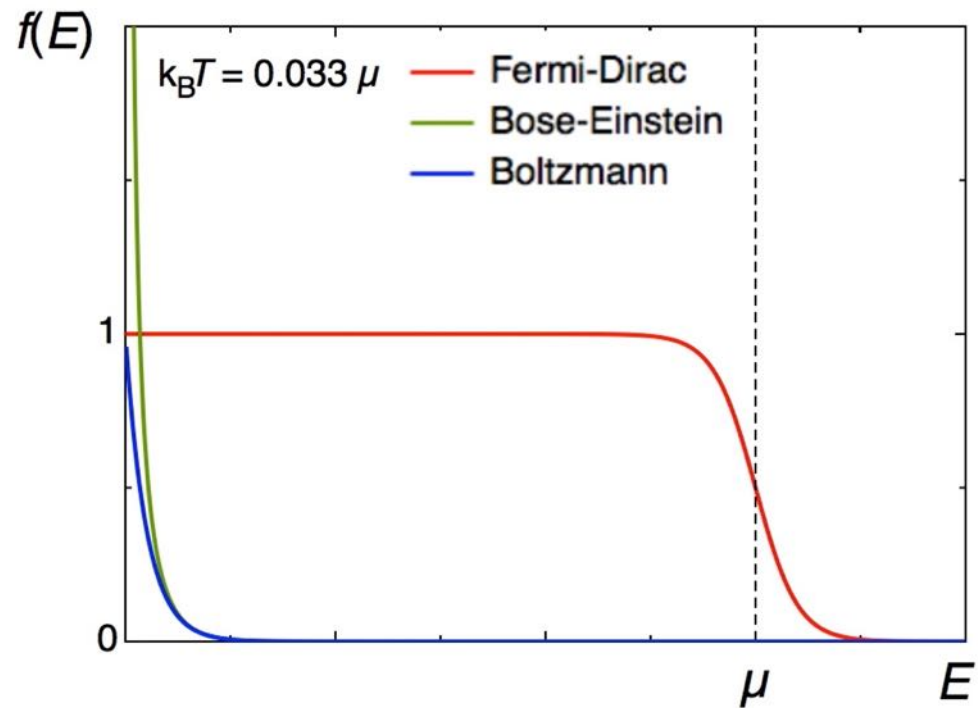
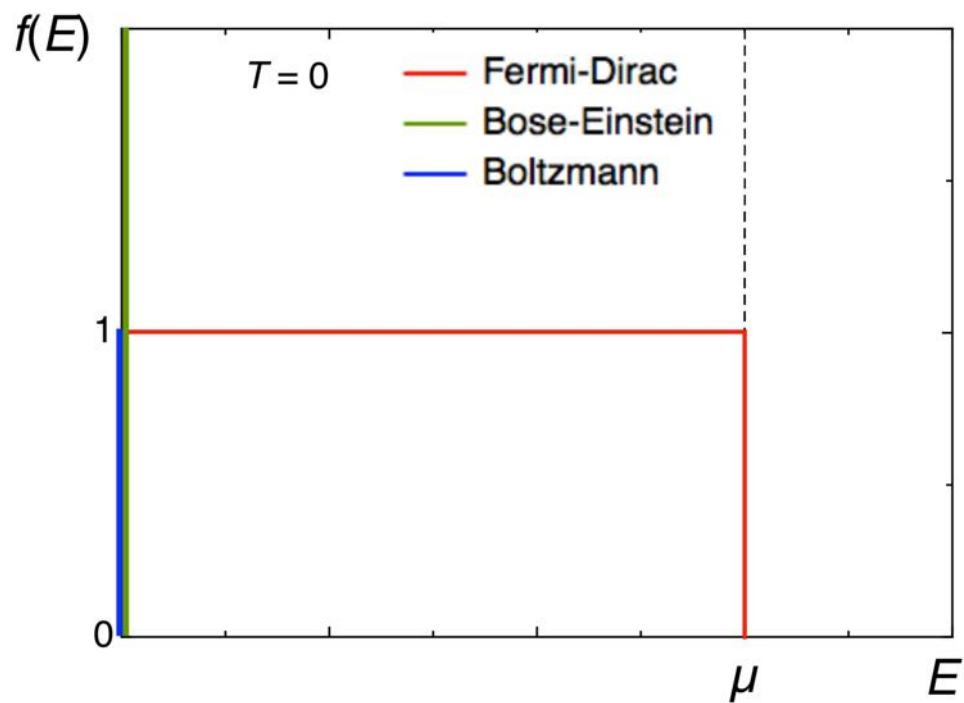
$$e^{-E/k_B T}$$

**Bosonen
(Bose-Einstein):**

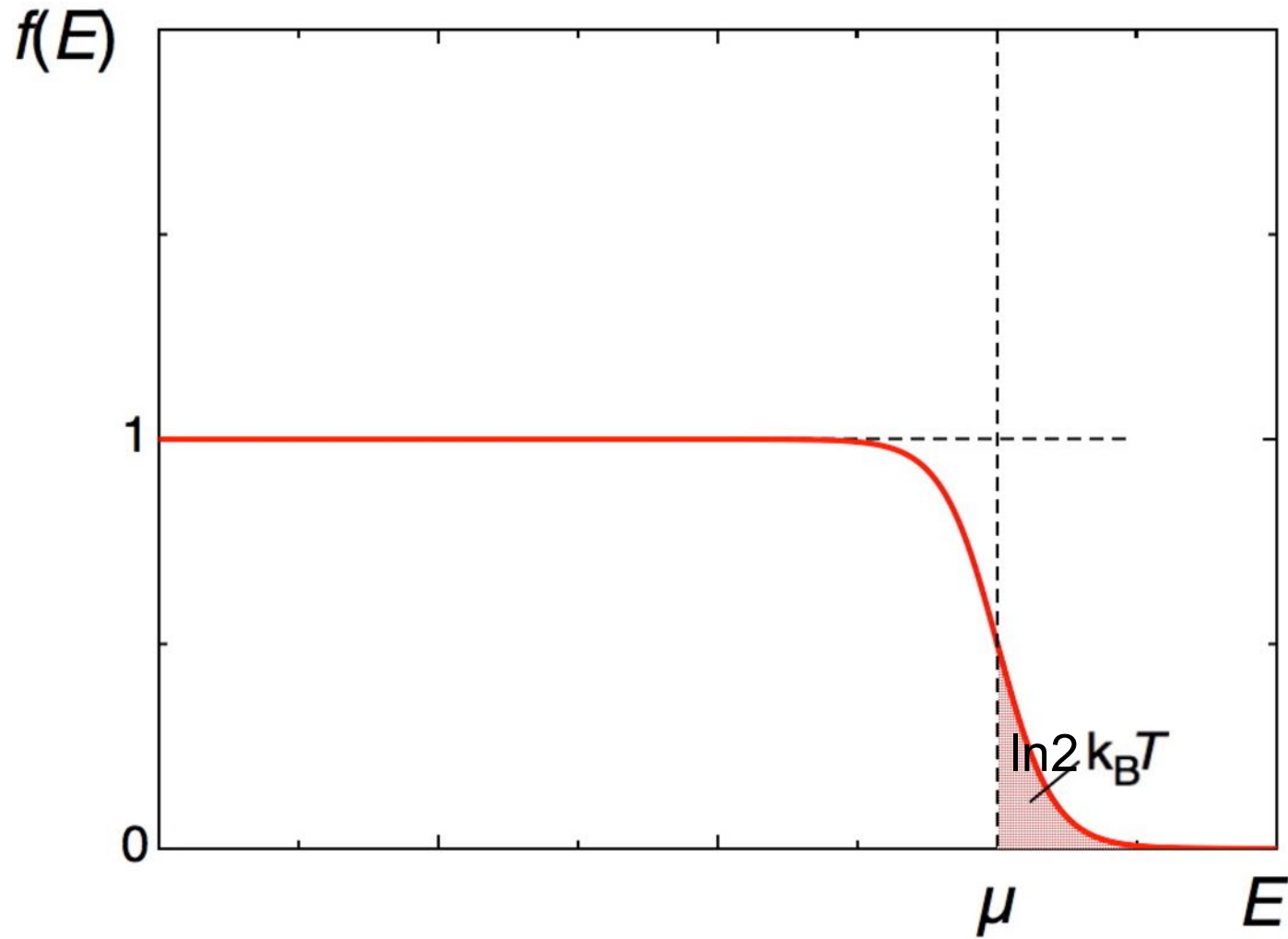
$$\frac{1}{e^{E/k_B T} - 1}$$

**Fermionen
(Fermi-Dirac):**

$$\frac{1}{e^{(E-\mu)/k_B T} + 1}$$

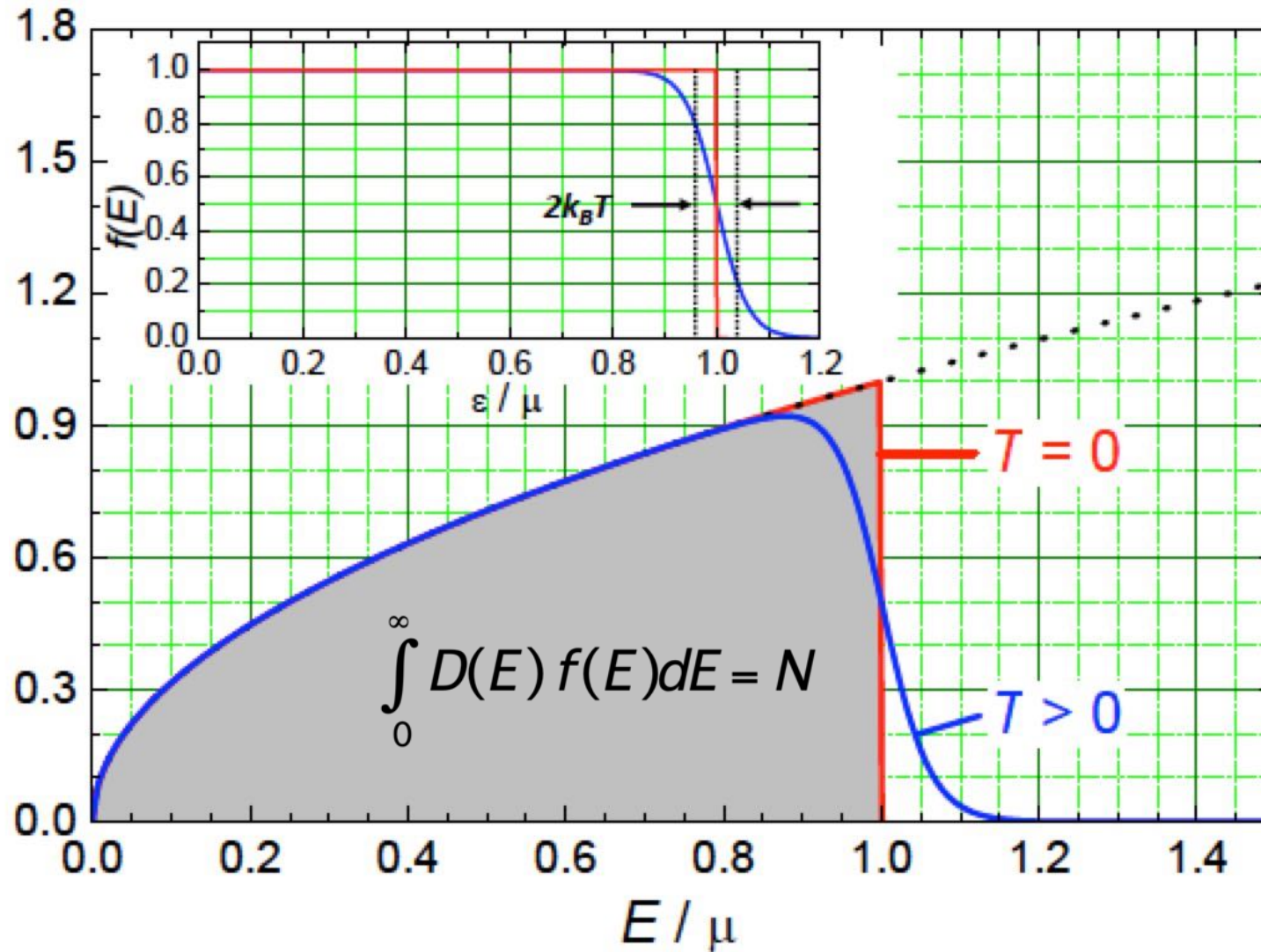


Verbreiterung der Fermi-Dirac Verteilung bei $E = \mu$ für $T > 0$:

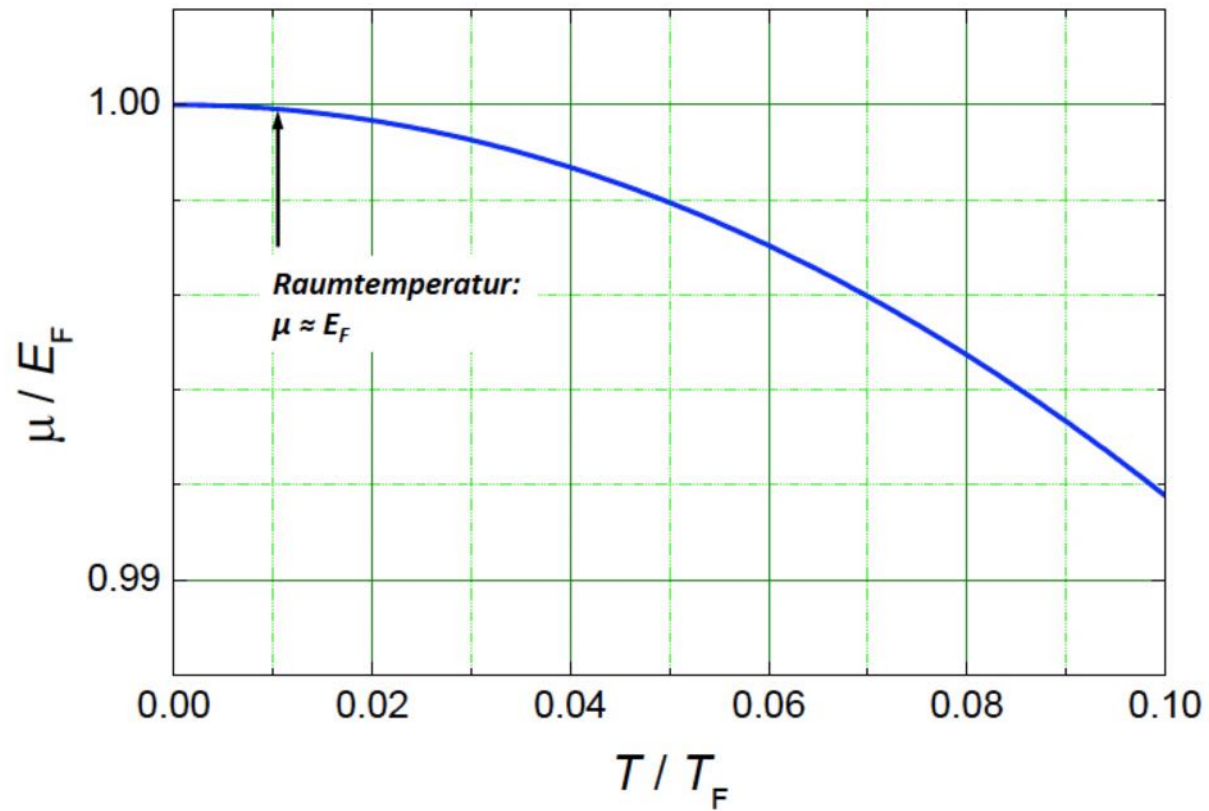


Verbreiterung der Verteilung der Elektronenzustände für $T > 0$:

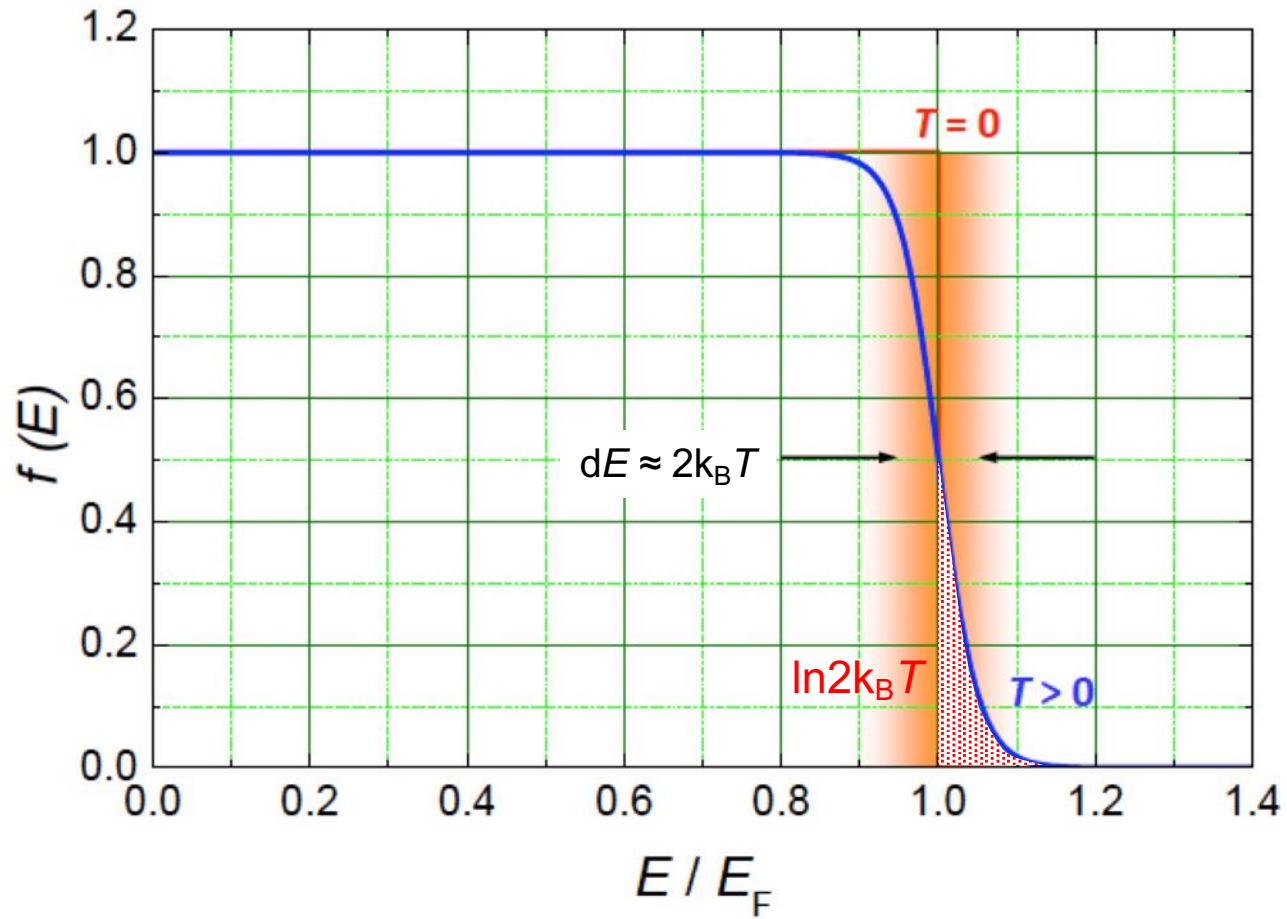
$D(E) f(E)$



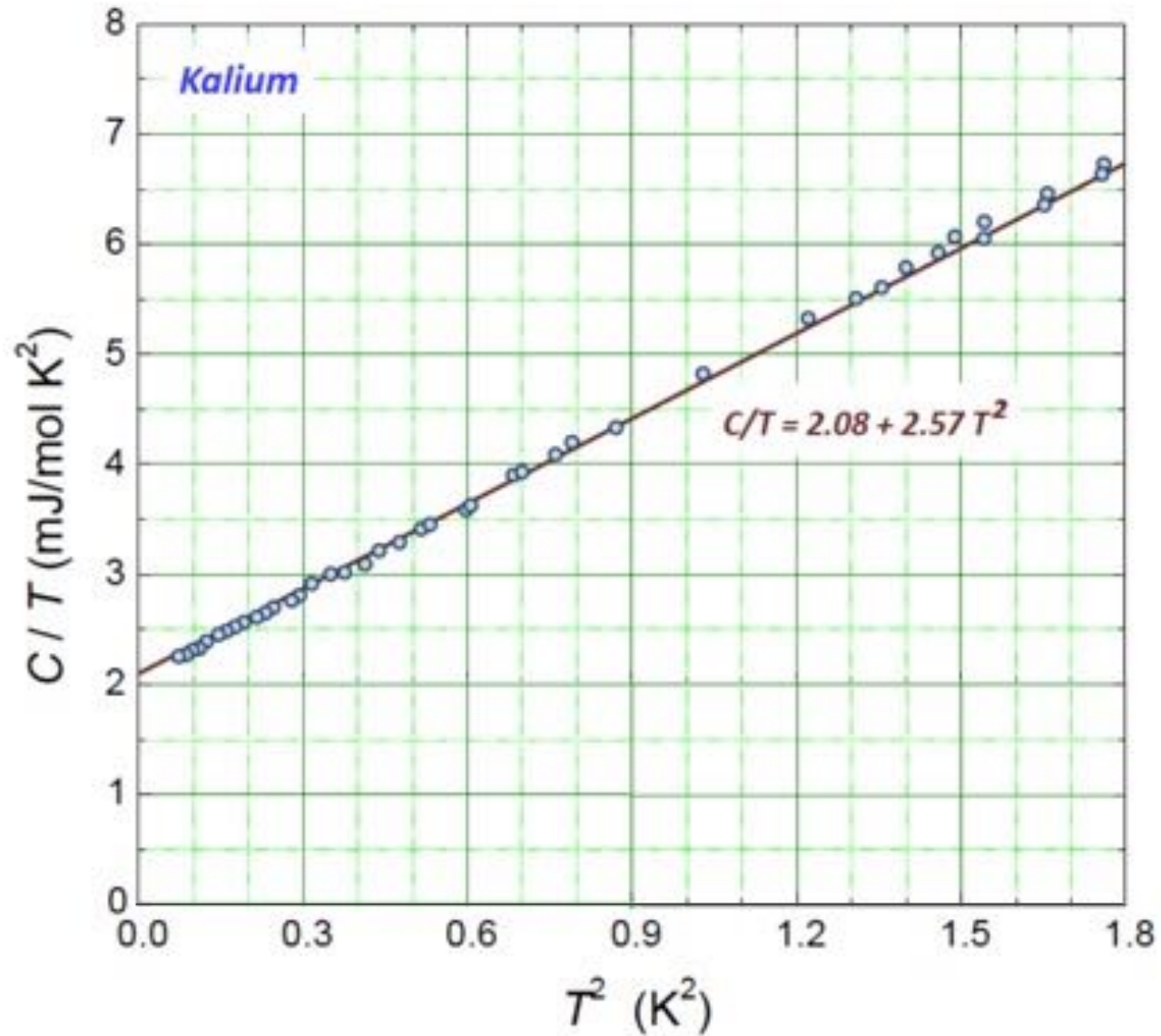
Temperaturabhängigkeit des chemischen Potentials μ :



Nur Elektronenzustände nahe E_F tragen zur spezifischen Wärme bei



Beitrag des Elektronengases zur spezifischen Wärme:

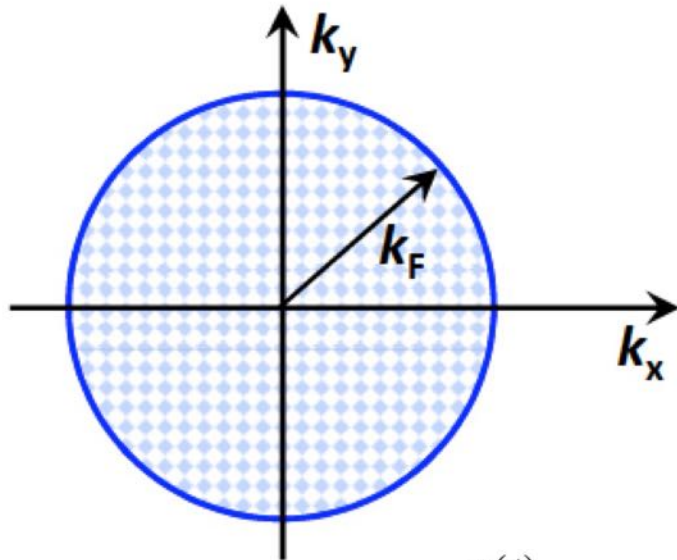


Beitrag des Elektronengases zur spezifischen Wärme:

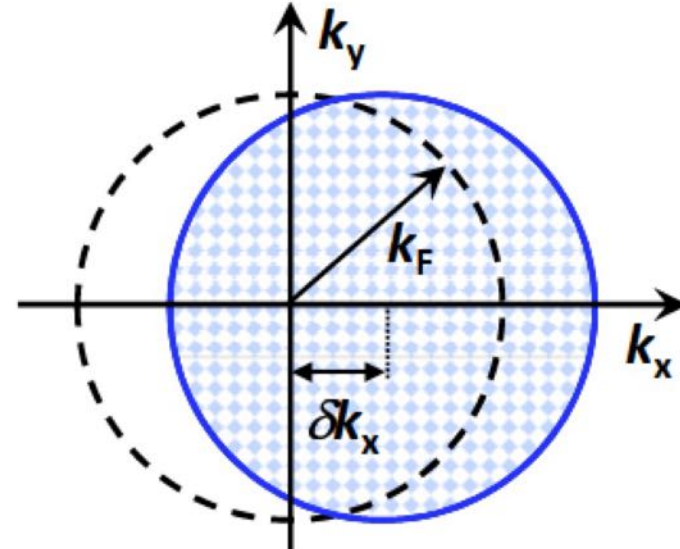
Metall	γ_{exp} (10^{-3} J / mol K ²)	γ_{theor} (10^{-3} J / mol K ²)	$\gamma_{\text{exp}}/\gamma_{\text{theor}}$
Li	1.63	0.749	2.18
Na	1.38	1.094	1.26
K	2.08	1.668	1.25
Rb	2.41	1.911	1.26
Cs	3.20	2.238	1.43
Fe	4.98	0.498	10
Co	4.98	0.483	10.3
Ni	7.02	0.458	15.3
Cu	0.695	0.505	1.38
Ag	0.646	0.645	1.00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

Fermi-Kugel im elektrischen Feld

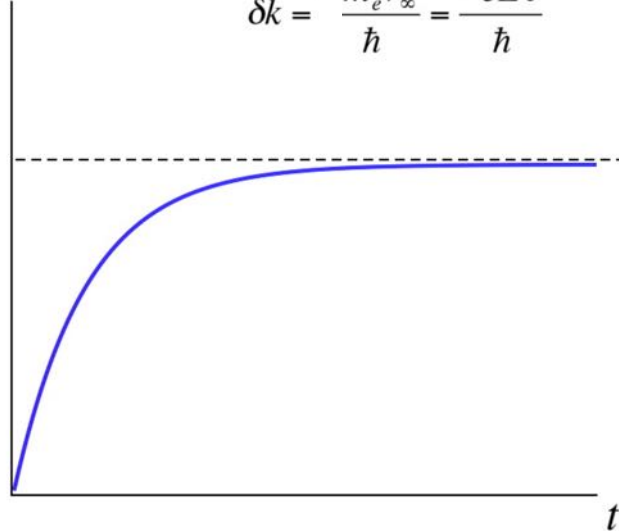
$$E = 0$$



$$E \neq 0$$



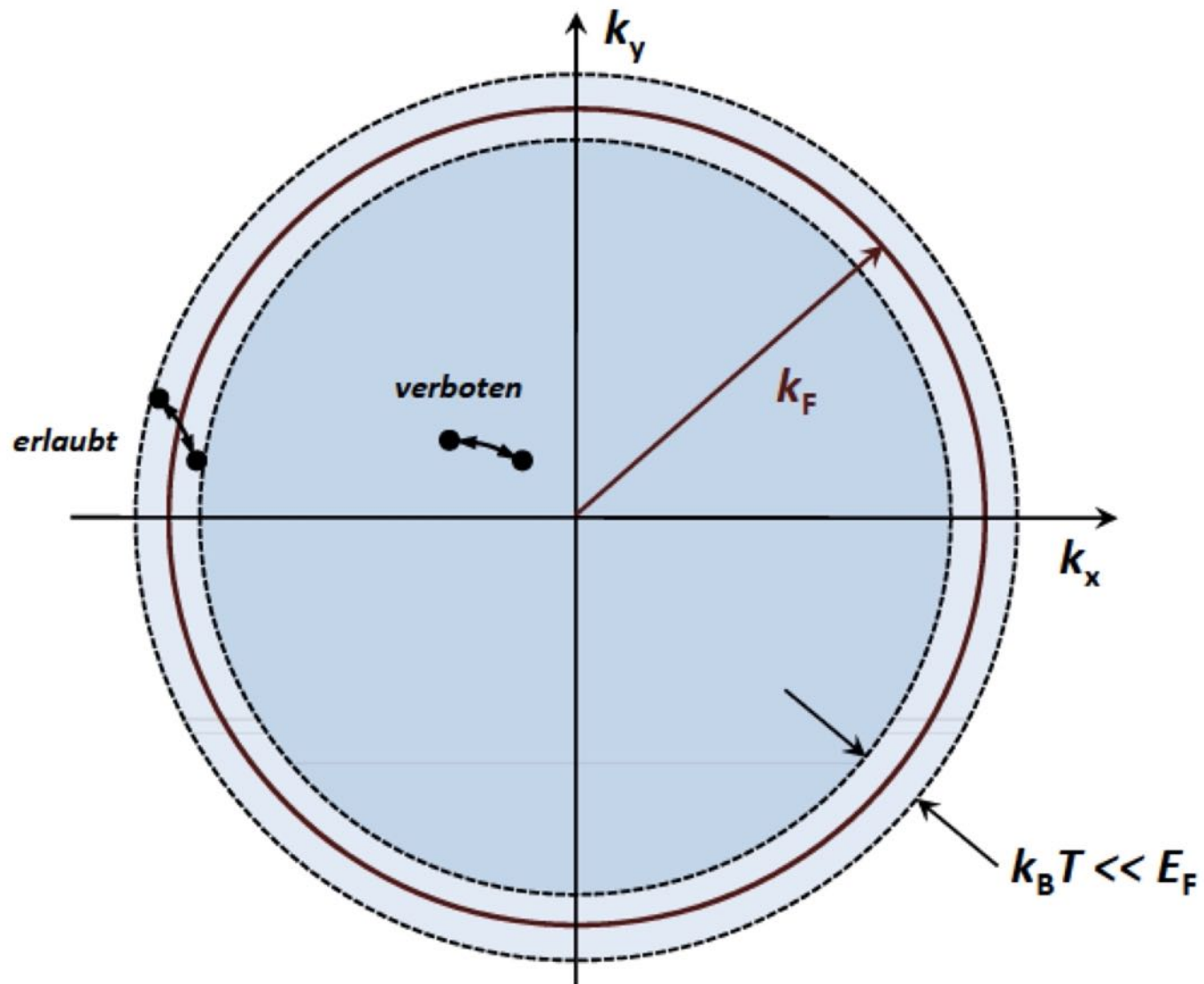
$v(t)$



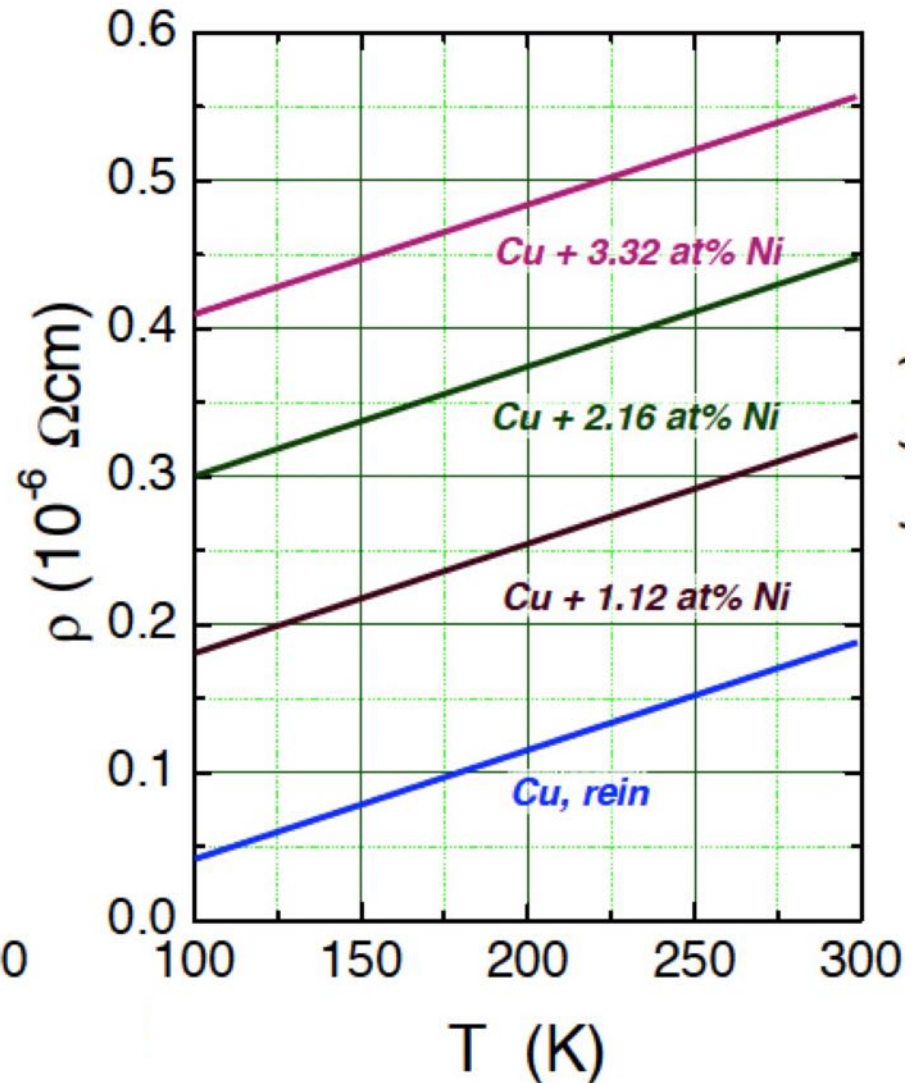
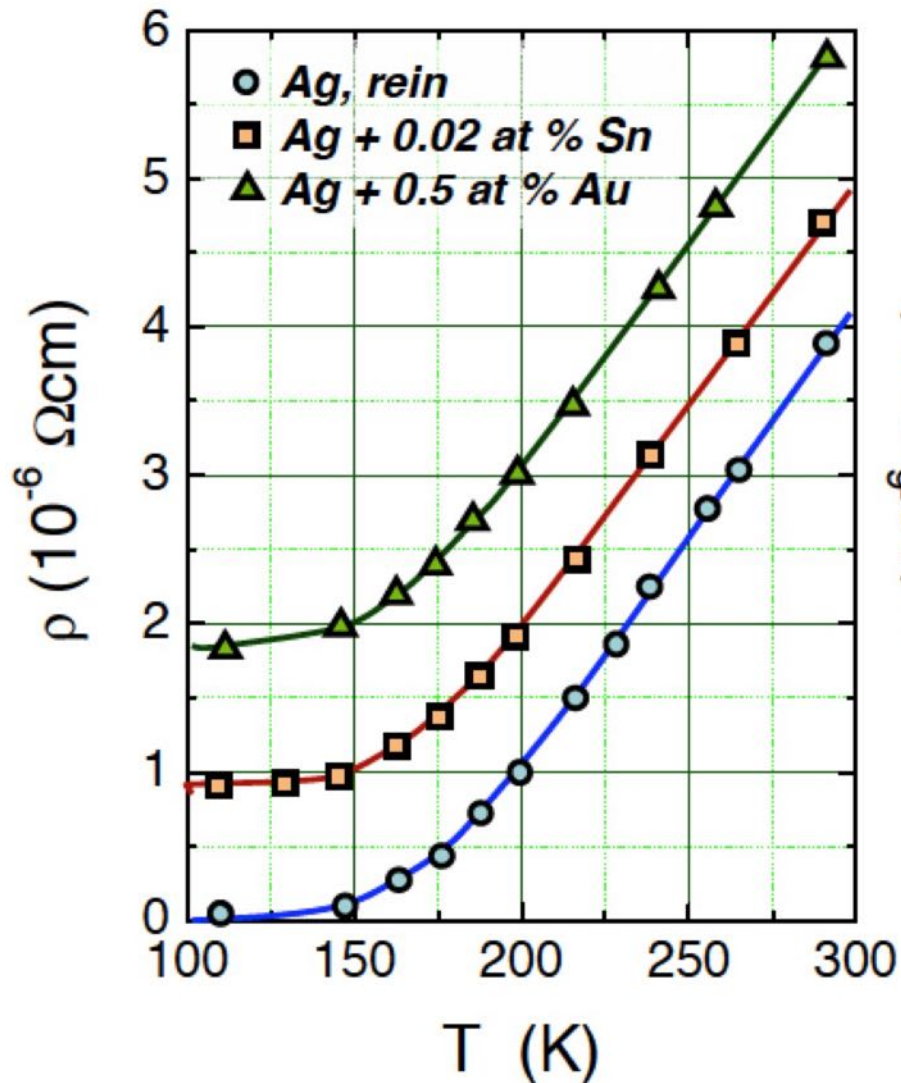
$$\delta k = \frac{m_e v_\infty}{\hbar} = \frac{-eE\tau}{\hbar}$$

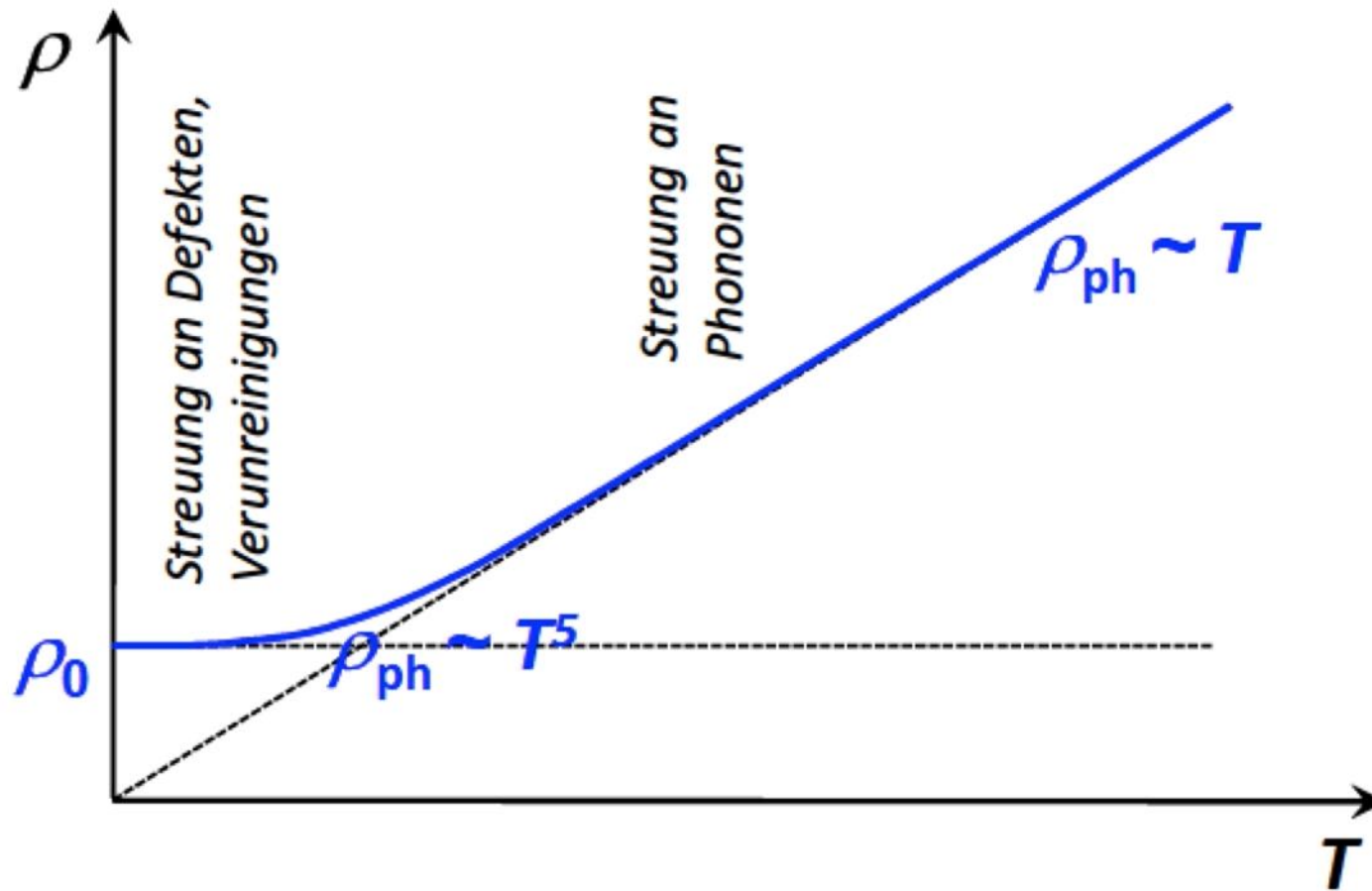
$$v_\infty = \frac{-eE\tau}{m_e}$$

Nur Elektronenzustände nahe E_F beteiligen sich an Stossprozessen



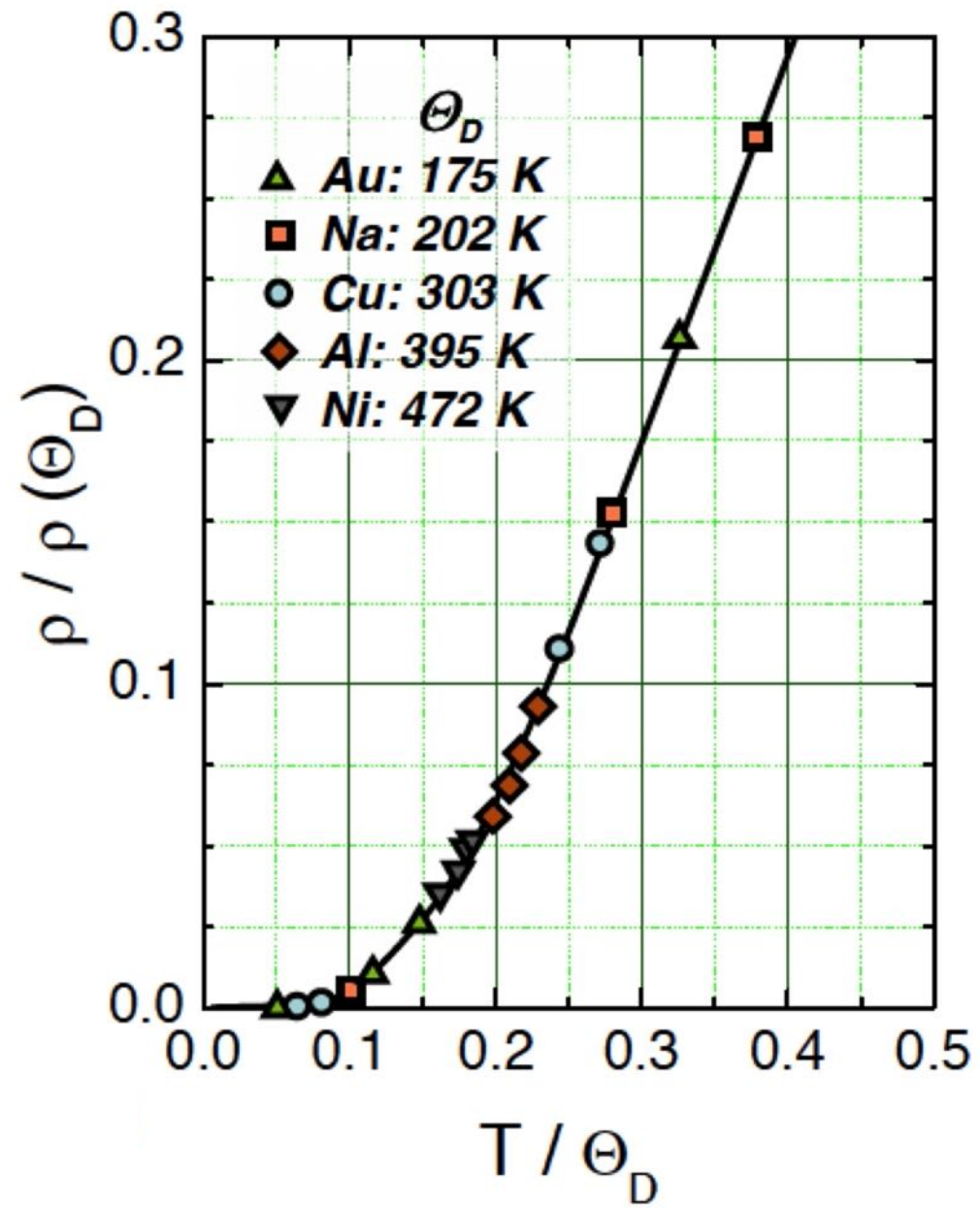
Restwiderstand - Einfluss von Verunreinigungen/Defekten





$$\rho(T) = \rho_0 + \lambda \frac{\pi k_B \Theta_D m_e}{8 e^2 \hbar n_e} \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^5 \int_0^{\Theta_D/T} \frac{x^5}{(e^x - 1)(1 - e^{-x})} dx \quad (\text{Bloch - Grüneisen})$$

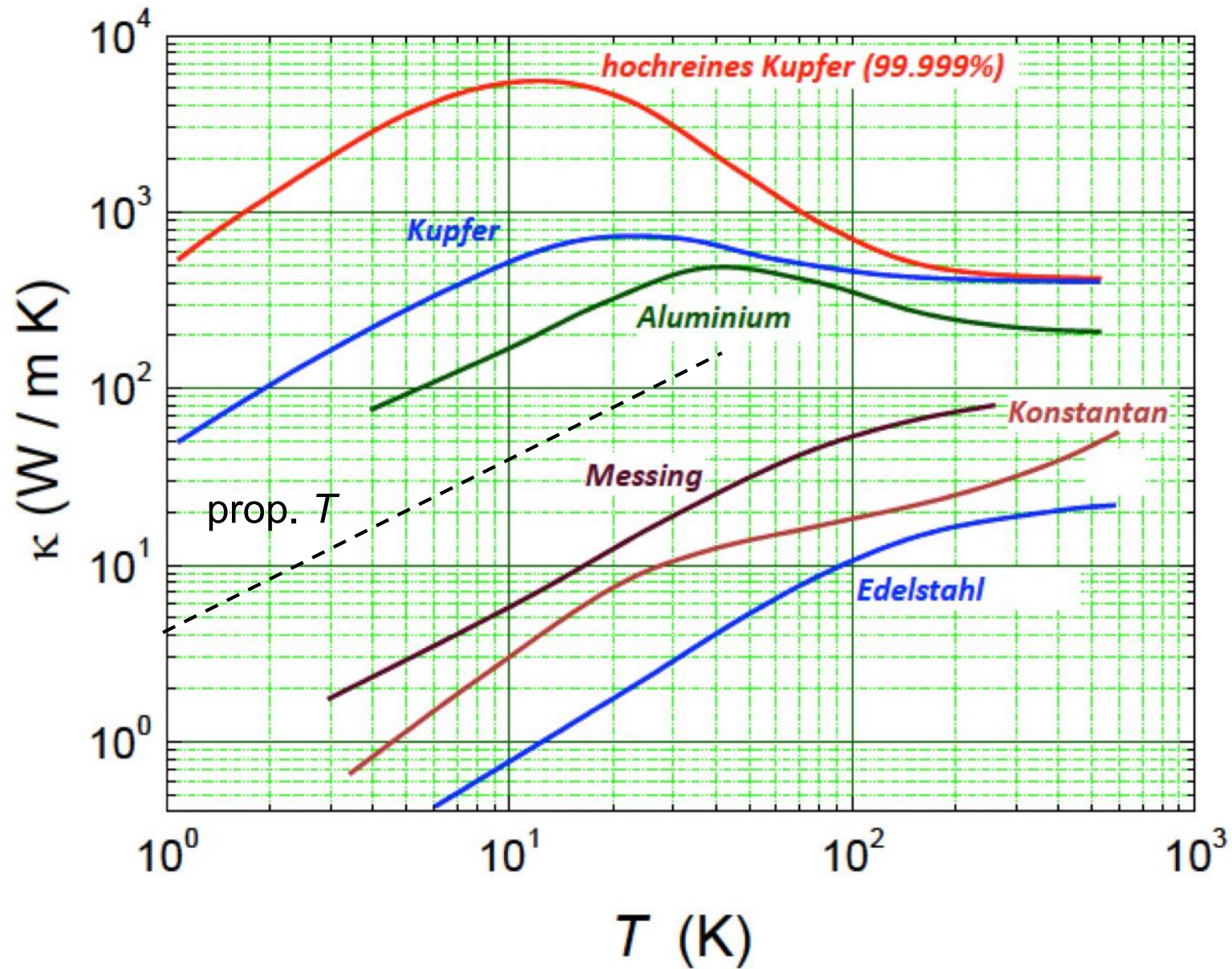
λ Mass für die Stärke der Elektron - Phonon Wechselwirkung



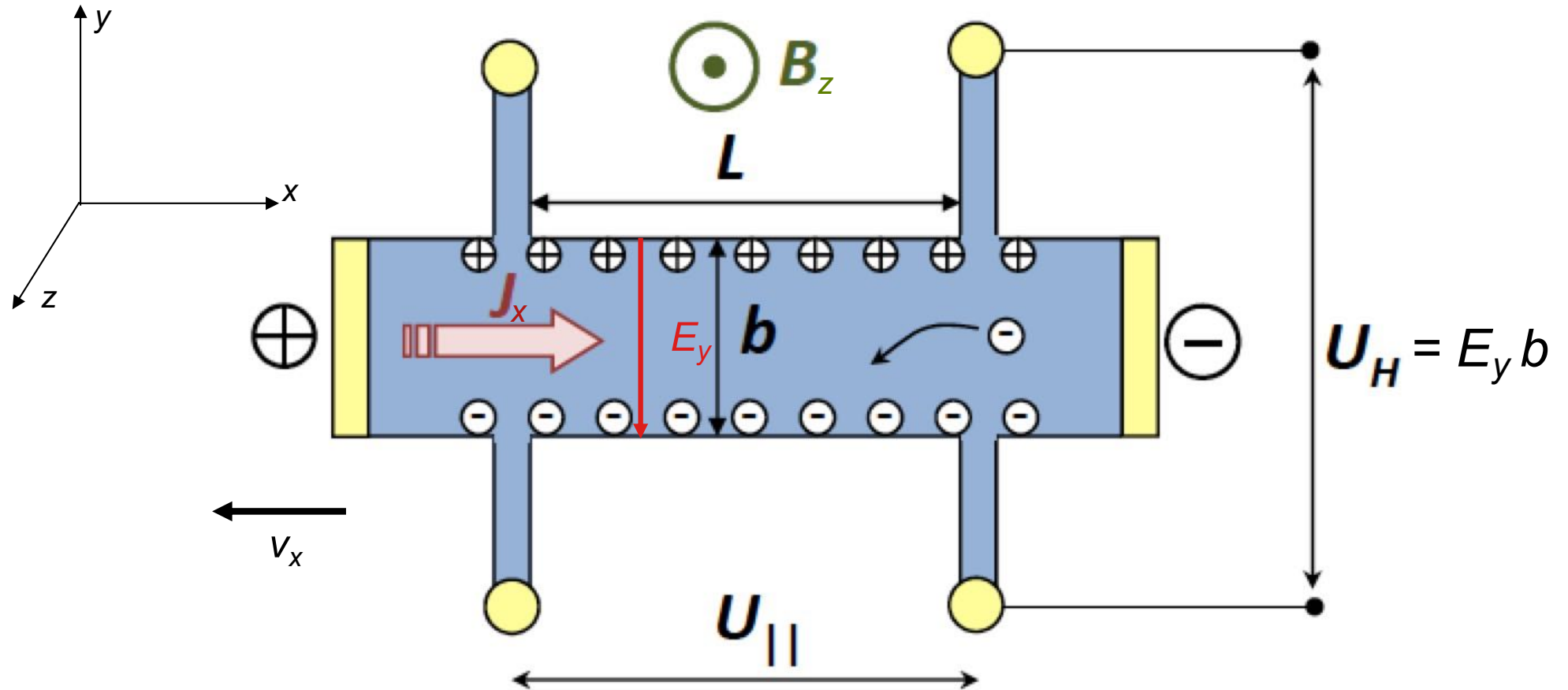
Elektronische thermische Leitfähigkeit:
Wiedemann-Franz Gesetz

Metall	κ (W/cm K)	L ($10^{-8} \text{W}\Omega/\text{K}^2$)	Metall	κ (W/cm K)	L ($10^{-8} \text{W}\Omega/\text{K}^2$)
Al	2.38	2.14	Na	1.38	2.12
Ag	4.18	2.31	Pb	0.38	2.47
Au	3.10	2.35	Pt	—	2.51
Cd	1.00	2.42	Sn	0.64	2.52
Cu	3.85	2.23	Nb	0.52	2.90
Fe	0.80	2.61	Sb	0.64	2.57
In	0.88	2.58	W	—	3.04
Mo	—	2.61	Zn	1.13	2.31

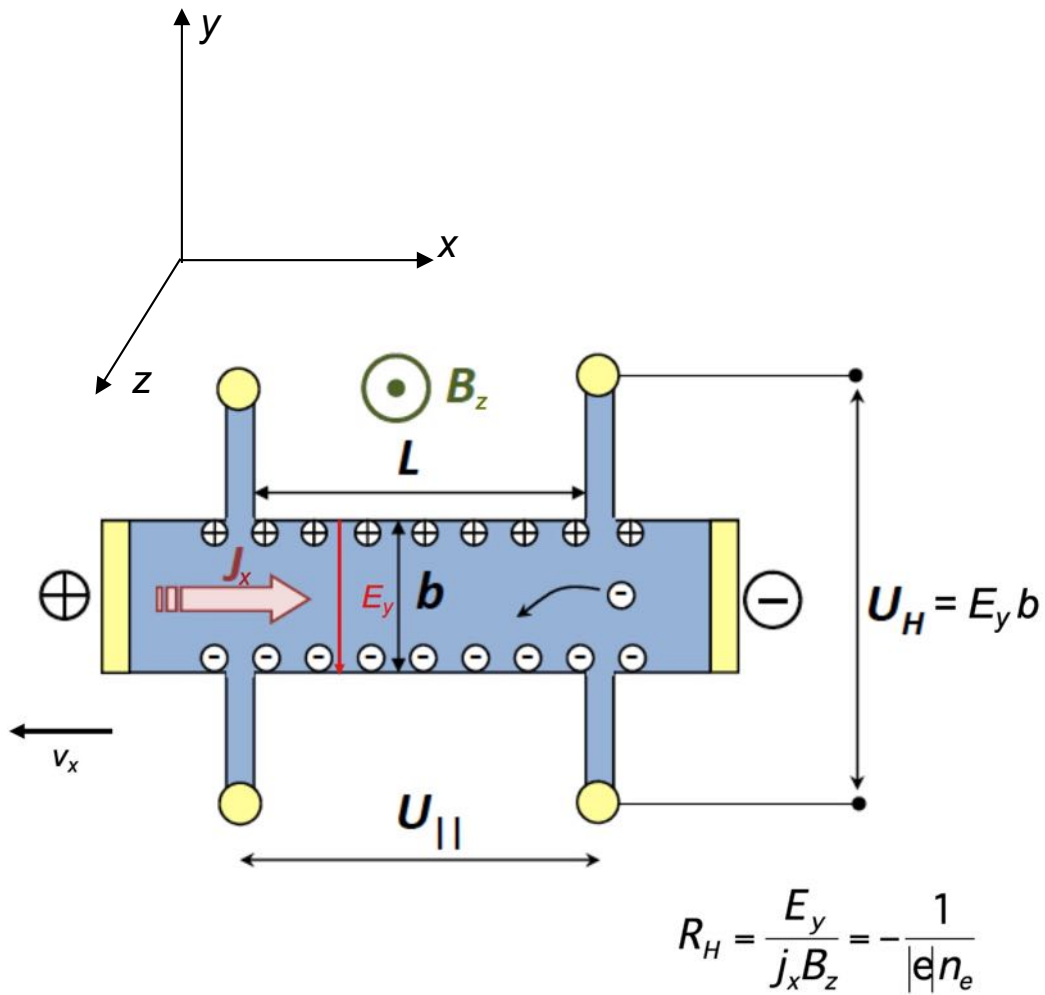
Elektronische thermische Leitfähigkeit:



Hall Effekt im Magnetfeld:



$$R_H = \frac{E_y}{j_x B_z} = -\frac{1}{|e|n_e}$$



VI.4 Verhalten im Magnetfeld

VI.4.1 Hall-Effekt

$$\vec{E} = (E_x, 0, 0)$$

$(U_H = E_x \cdot L)$

$$\vec{B} = (0, 0, B_z) \quad \text{Mittelwert}$$

$$q = -|e| < 0$$

$$\vec{v} = (v_x, 0, 0)$$

$$j_x = -n_e \overline{v_x} |e| > 0$$

\uparrow
 < 0

Im Gleichgewicht: $\vec{F}_C = -\vec{F}_L$

$$\vec{F}_L = q \vec{v} \times \vec{B}$$

$< 0 < 0$

$$F_{Ly} = -|e| \cdot B_z \cdot \frac{j_x}{n_e |e|}$$

$$= -B_z \frac{j_x}{n_e} < 0$$

$$F_{Cy} = -E_y |e| > 0$$

\uparrow
 < 0

$$\stackrel{!}{=} -F_{Ly} = B_z \frac{j_x}{n_e}$$

$$E_y = -B_z \frac{j_x}{|e| n_e}$$

"Hall-Feld"

Hall-Spannung $U_H = E_y \cdot b$

Hall Konstante $R_H := \frac{E_y}{j_x B_z} = -\frac{1}{n_e |e|}$

→ Bestimmung von n_e (Tabelle)

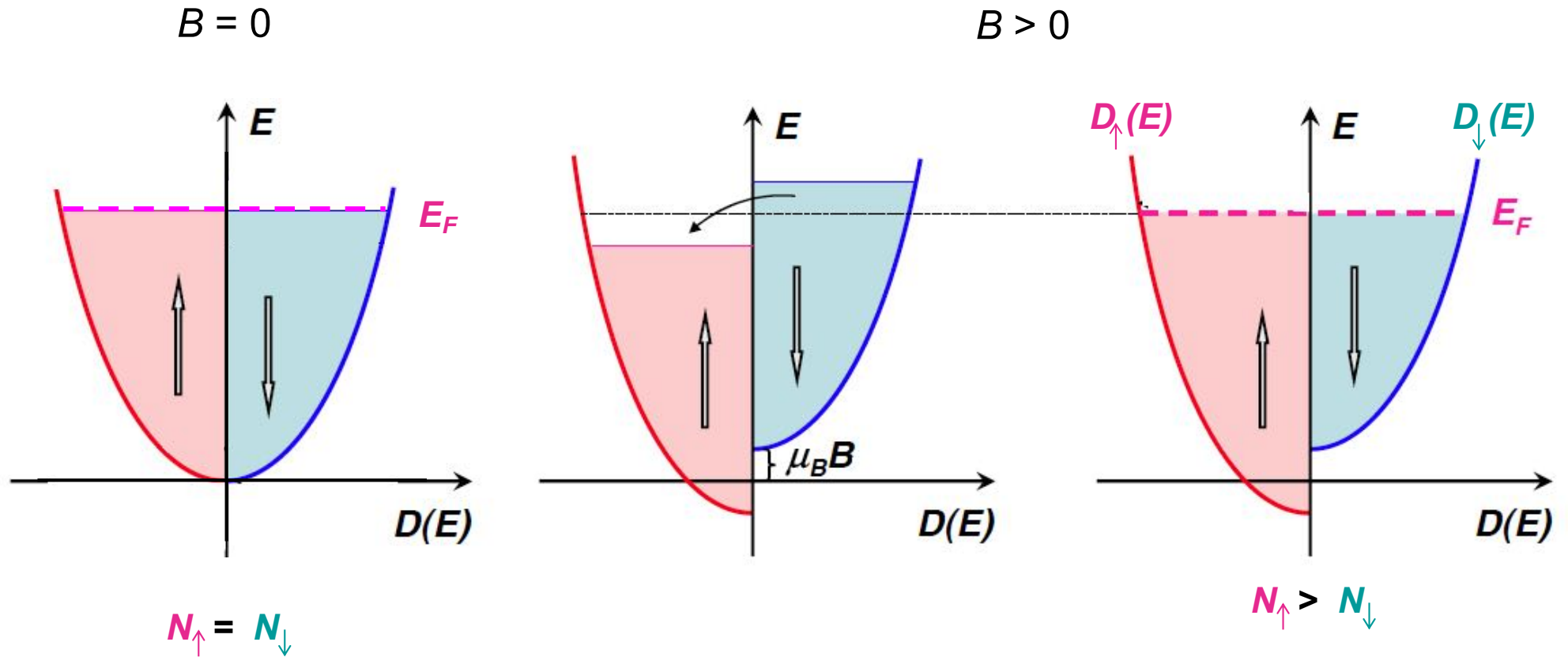
Messen: U_H , bekannt b
 $I \rightarrow j_x, B(B_z) \rightarrow n_e$

Hall Effekt im Magnetfeld:

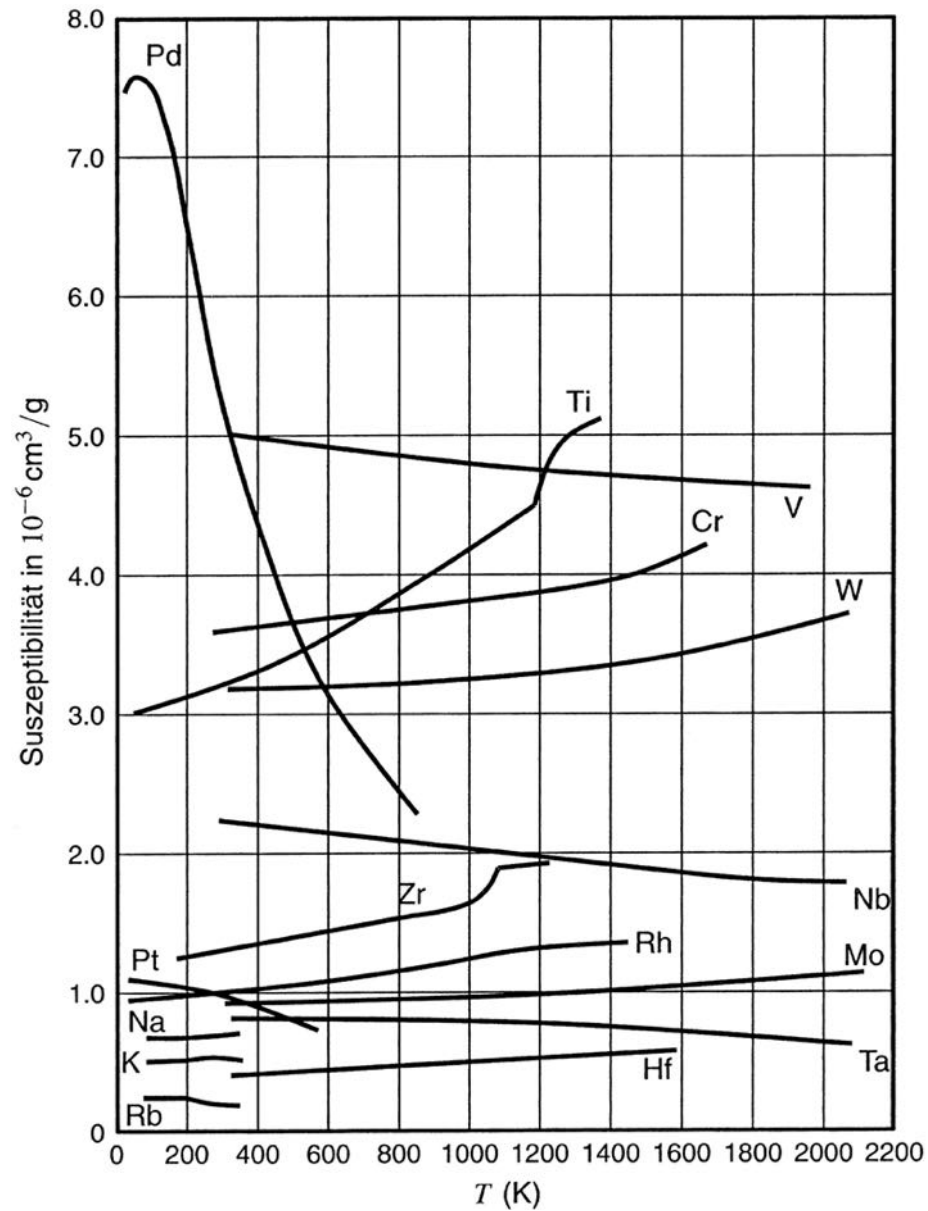
METAL	VALENCE	$-1/R_H n_e$
Li	1	0.8
Na	1	1.2
K	1	1.1
Rb	1	1.0
Cs	1	0.9
Cu	1	1.5
Ag	1	1.3
Au	1	1.5
Be	2	-0.2
Mg	2	-0.4
In	3	-0.3
Al	3	-0.3

$$R_H = \frac{E_y}{j_x B_z} = -\frac{1}{|e|n_e}$$

Elektronische Zustandsdichte im Magnetfeld:

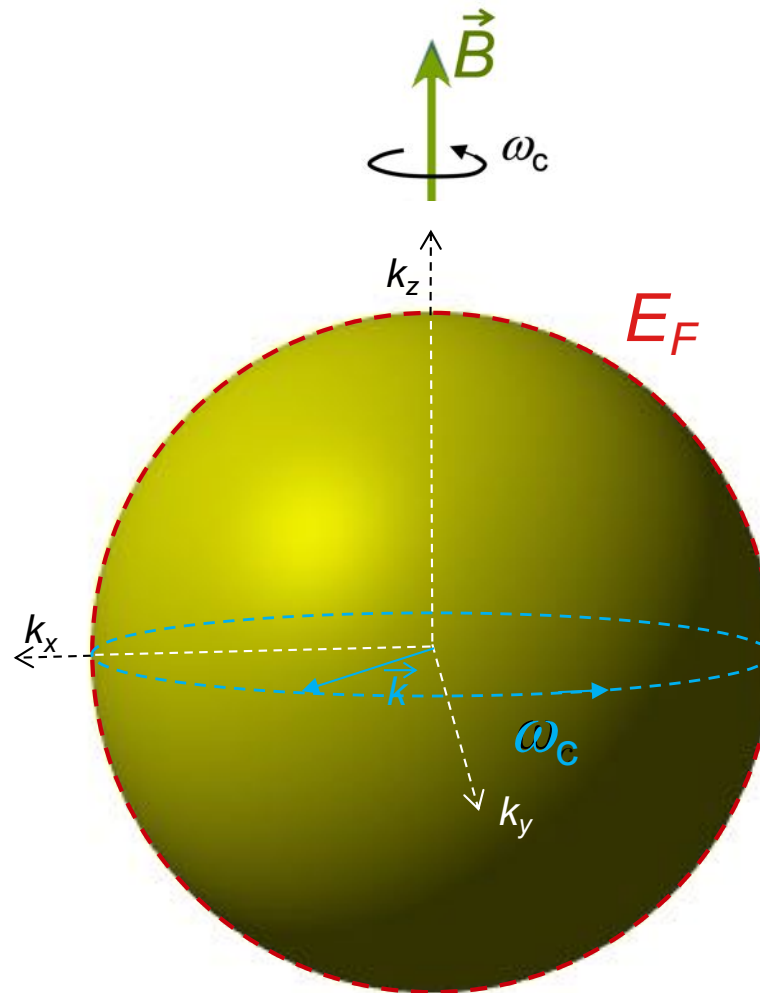


Magnetische Suszeptibilität von Metallen:



$$\chi_{Pauli} = \mu_0 \mu_B^2 D(E_F) / V$$

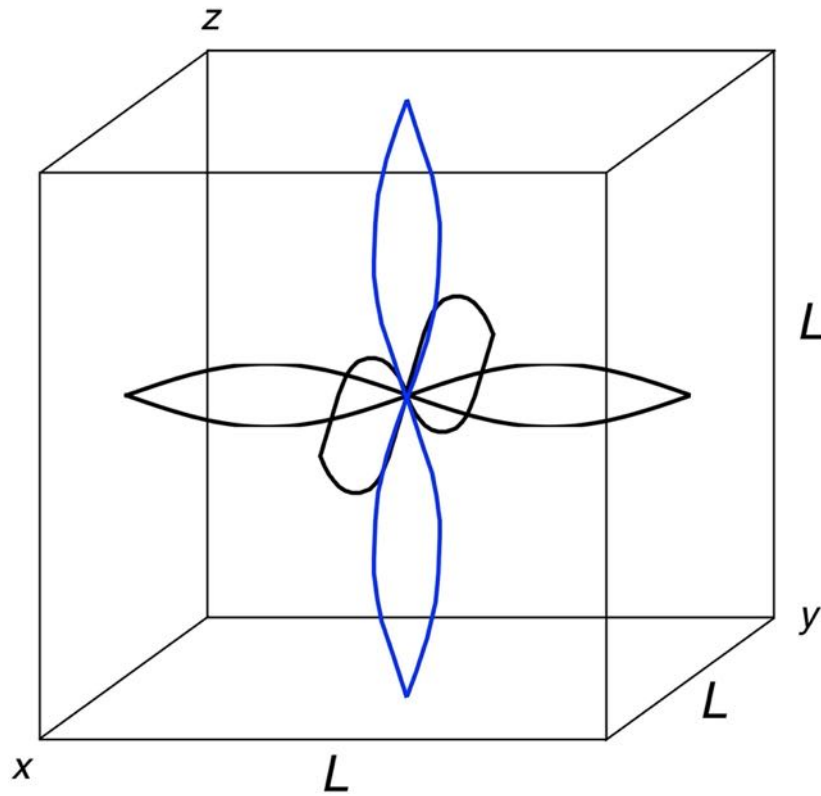
Freie Elektronen, schwache Magnetfelder:
Halbklassisch: Rotation der Fermi-Kugel



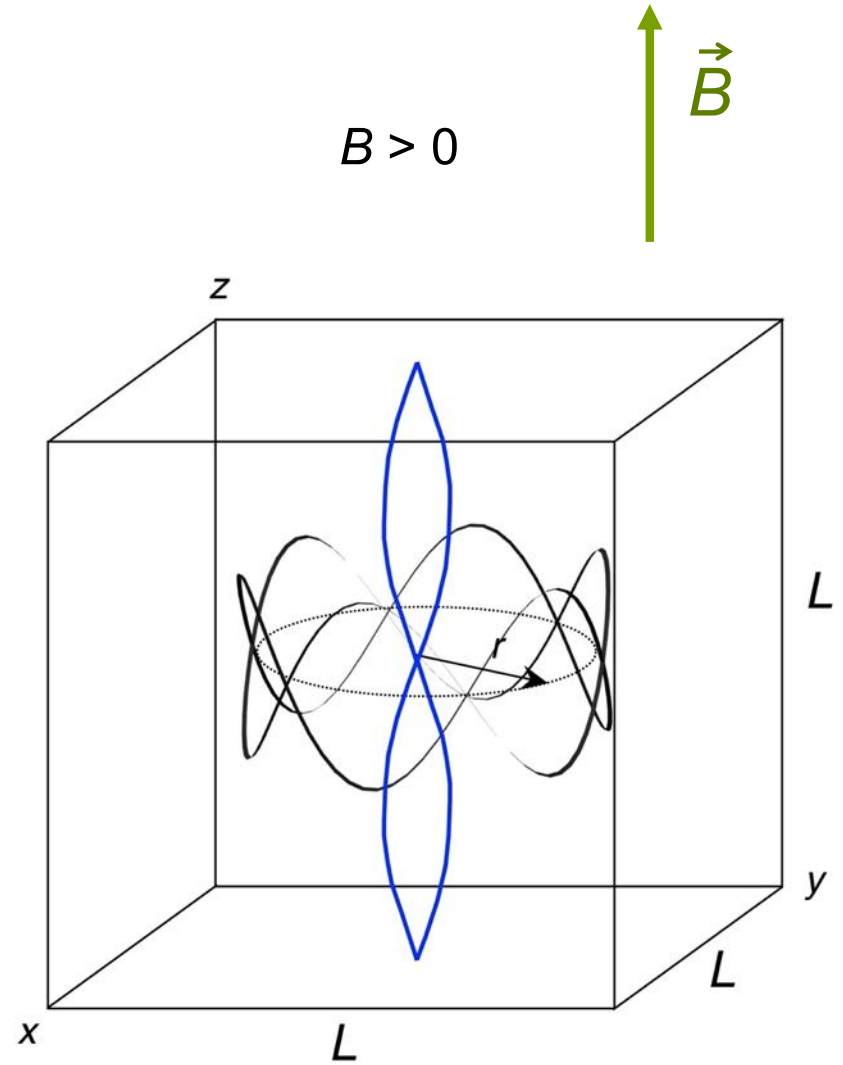
Bahnquantisierung im Magnetfeld:

Periodische Randbedingungen

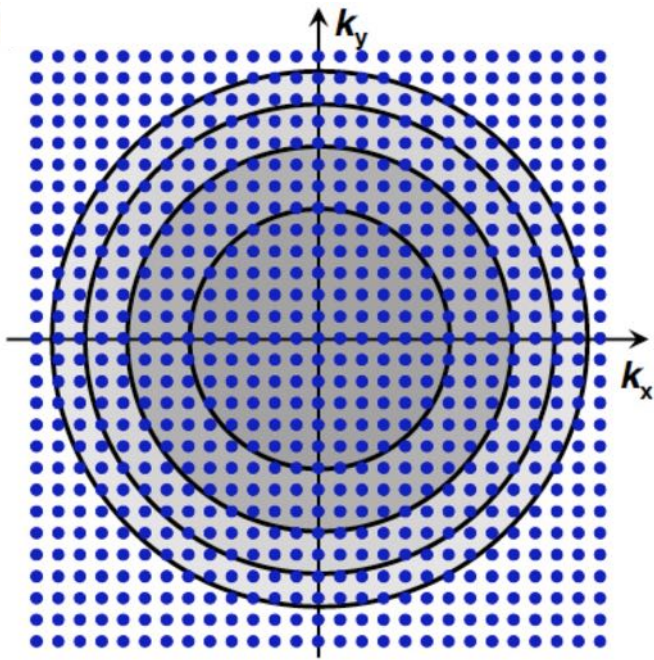
$$B = 0$$



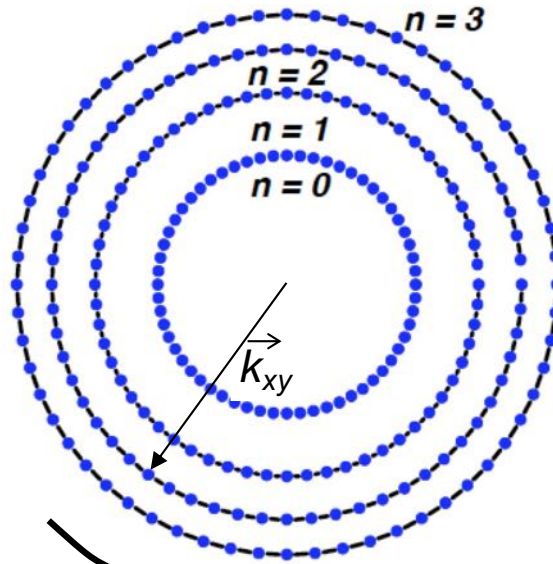
$$B > 0$$



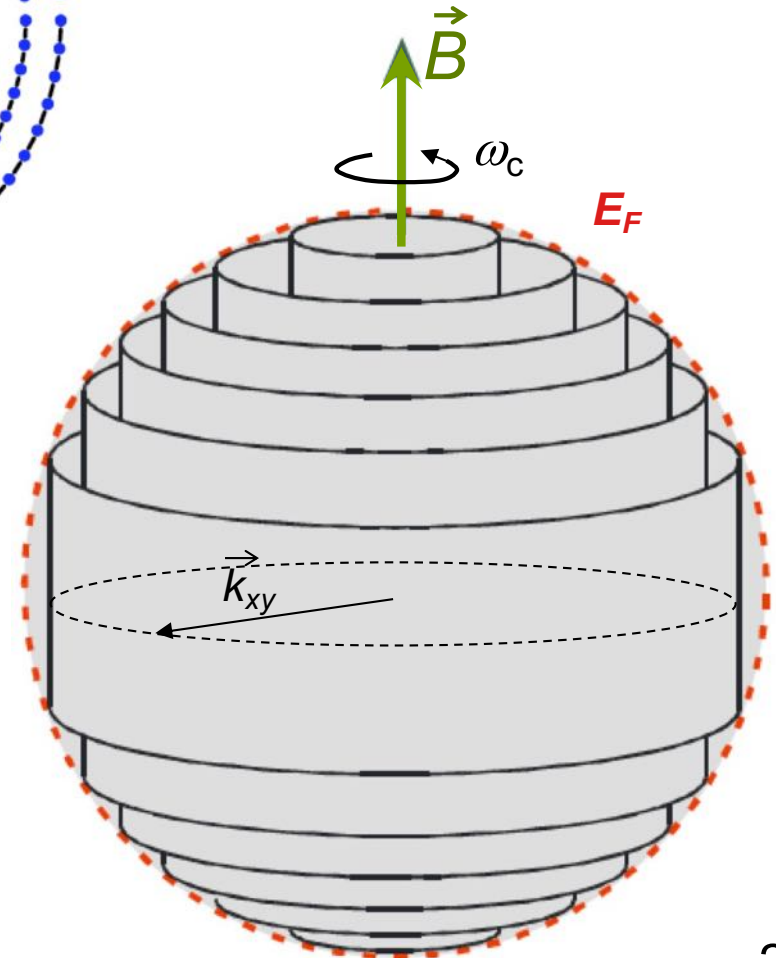
Bahnquantisierung im Magnetfeld:



$B = 0$

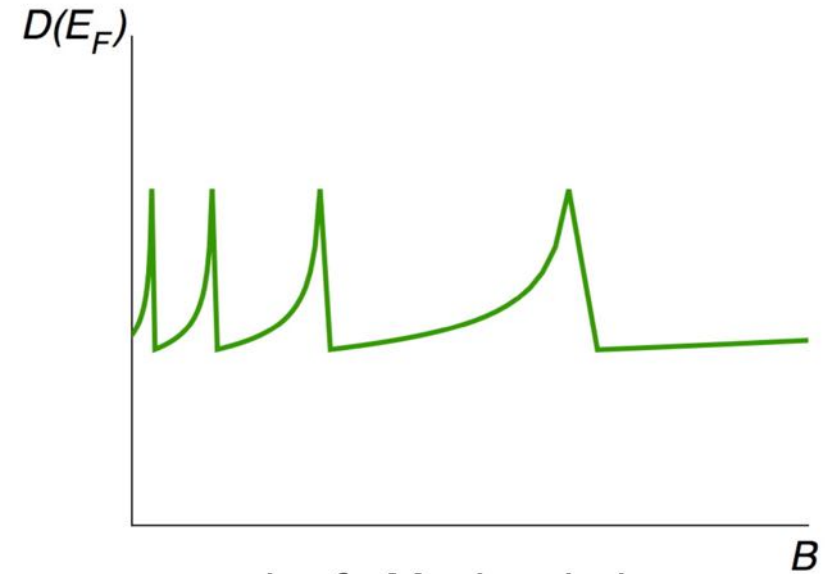
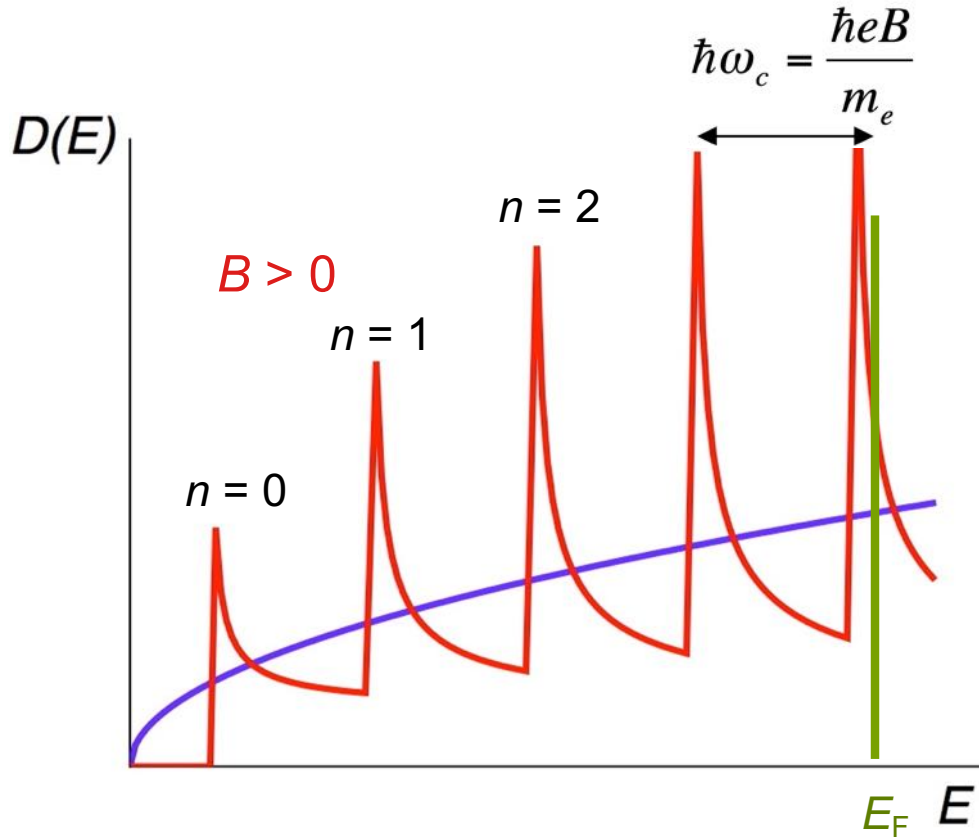


$B > 0$



Bahnquantisierung im Magnetfeld:

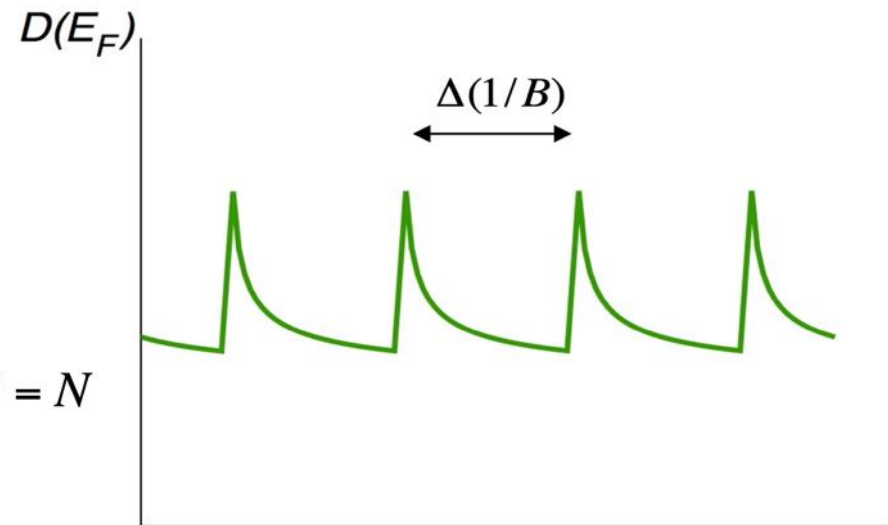
Elektronische Zustandsdichte



scharfe Maxima bei

$$E(n) = \hbar\omega_c (n + 1/2) = \frac{\hbar e B}{m_e} (n + 1/2) = E_F$$

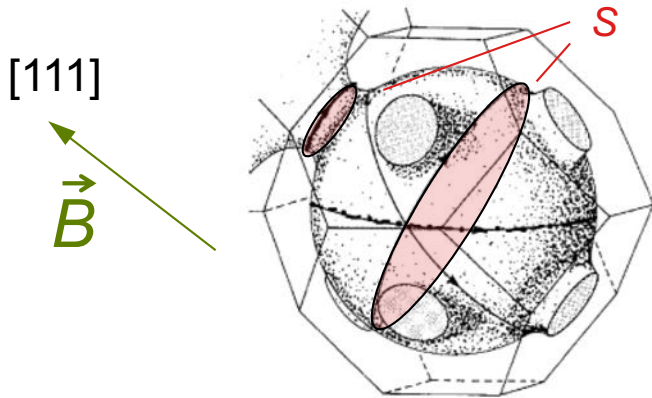
$$\frac{\partial(1/B)}{\partial n} = \Delta(1/B) = \frac{e\hbar}{m_e E_F} = \frac{2\pi e}{\hbar(\pi k_F^2)} = \text{const.}$$



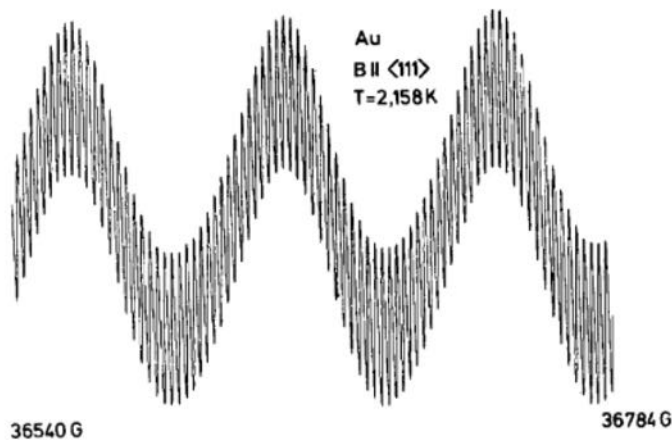
E_F bzw. μ wird bestimmt durch $\int_0^{\infty} D(E) f(E) dE = N$

Bahnquantisierung im Magnetfeld:

Magnetische Suszeptibilität: de Haas-van Alphen Effekt



Fermi-Fläche der Edelmetalle Ag, Au, Cu. Für ein Magnetfeld, das in die [111]-Richtung weist, gibt es zwei Extremalbahnen und daher zwei dominante Perioden in der Oszillation der magnetischen Suszeptibilität.



Messung der magnetischen Suszeptibilität von Au mit dem Magnetfeld in die [111]-Richtung orientiert.

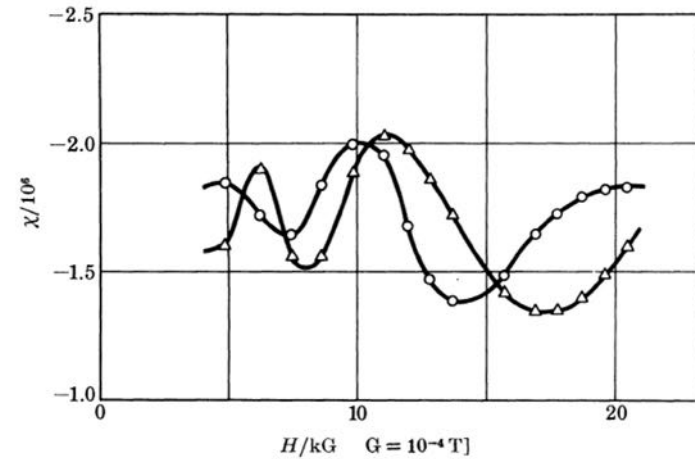


FIGURE 1. Oscillatory field dependence of susceptibility ($\chi = M/H$) of bismuth at 14.2 K (de Haas & van Alphen 1930). \circ , H perpendicular to B ; \triangle , H parallel to B .

Periode in $1/B$: Mass für die Fläche S der Extremalbahnen des Fermi-Körpers

$$\frac{\partial(1/B)}{\partial n} = \Delta(1/B) = \frac{e\hbar}{m_e E_F} = \frac{2\pi e}{\hbar(\pi k_F^2) S} = const.$$

