

Festkörperphysik

Anwendungsbeispiele Nr.4 | Wanda Duss

A short Roadmap

1) Starre Atomgitter

Beschreibung?

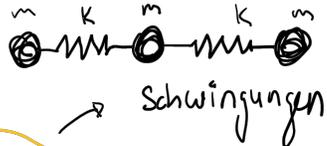
Streuung an Ebenen

2) Bindungen

Warum sind Materialien stabil?

Starke & schwache Bindungen

3) Nicht so starre Gitter



Woher kommt die Energie für Schwingungen?

=> Wärme!

Statistical Physics appears

4) Elektronen

Können sich frei bewegen? =>

Tragen Ladung

El. Leitfähigkeit

5) Spin

Magnetisierung?

Ionen & Elektronen haben Spin

You are here

Idee: Elektronen tragen Energie & Ladung \Rightarrow Wärme, EL. Leitfähigkeit

- Elektronen haben eine fixe Anzahl
- Pauli-Prinzip: Zwei Elektronen können nicht im selben Zustand $\Psi = \tilde{\psi}(\mathbf{r}) \cdot \chi(s)$ sein
- Im Grundzustand des Systems ($T=0$) versuchen Elektronen die Energie des Systems zu minimieren \Rightarrow Zustände mit möglichst tiefer Energie

\Rightarrow Bei $T=0$ werden Elektronen die möglichen Energiezustände von unten auffüllen bis ihre Anzahl erreicht ist

Das einfachste System :

Elektronen - Gas

"Was sind die möglichen Energiezustände?"

• Elektronen interagieren nicht

• Hat keine Potential-Struktur aber begrenzte Grösse \Rightarrow Elektronen bilden stehende Wellen (particle in a box)

$$\Psi = A e^{i(k_x x + k_y y + k_z z)} \chi(s) \quad \text{mit } k_i = \frac{n_i \pi}{L}$$

$$N \rightarrow \infty \\ \Rightarrow \triangleright$$

n_i wird quasi-kontinuierlich

$$\Rightarrow E(n_x, n_y, n_z) = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

$$E(\vec{n}) = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} |\vec{n}|^2$$

Zustände derselben Energie haben dasselbe $|\vec{n}|^2 \rightarrow$ Das System füllt Schale für Schale von unten auf

Achtung : • Pro Zustand $2e^-$ (Spin)
• Nur positive n_i

$$\Rightarrow N \stackrel{!}{=} 2 \times \frac{1}{8} \times \frac{4}{3} \pi |n_{\max}|^3$$

spin *n_i positiv* *Kugelvolumen*

$$n_{\text{Fermi}} = n_{\max} \Rightarrow E_{\text{Fermi}} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \left(\frac{3N}{\pi} \right)^{2/3}$$

Nützlich:

Mit $V = L^3$ schreiben wir:

$$\bullet E_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{2/3} \quad \frac{N}{V} \equiv \# e^- \text{ pro UC} = n$$

$$\bullet k_F = (3\pi^2 n)^{1/3} \text{ s.t. } E_F = \frac{\hbar^2}{2m} k_F^2$$

$$\bullet P_F = \hbar k_F \quad T_F = E_F / k_B$$

Average energy of a ptcl. in a 2D-system
is $E = k_B T$

$$\bullet n = \frac{N}{V} = \frac{N_A \rho}{m_{\text{mol}}} \quad N_A \equiv \text{Avogadro}$$

für Systeme mit $1e^-$ pro Atom (Valenz)

29) Fermi-Gase Na, ${}^3\text{He}$, Neutronen

Berechnen Sie die Fermi-Grenzenergie (in eV), die Fermi-Temperatur und die Fermi-Geschwindigkeit von a) Natriummetall ($\rho = 0.97 \text{ g/cm}^3$, $m_{\text{mol}} = 23 \text{ g/Mol}$), b) flüssigem ${}^3\text{He}$ (Dichte $\rho = 82 \text{ mg/cm}^3$, $m_{\text{mol}} = 3 \text{ g/Mol}$), und c) eines Neutronensterns mit 1.5 Sonnenmassen und 15 km Durchmesser (ohne relativistische Effekte).

$$10^2 \text{ cm} = 1 \text{ m}$$

$$\text{a) } n = \frac{N_A \rho}{m_{\text{mol}}} = \frac{6 \times 10^{23} \times 0.97}{23} = 0.25 \times 10^{23} \frac{1}{\text{cm}^3} = 25 \times 10^{27} \frac{1}{\text{m}^3}$$

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left(3\pi^2 n \right)^{2/3}$$

Note: $m_e c^2 = 0.51 \text{ MeV}$
 $\hbar c = 200 \text{ MeV fm} = 200 \text{ eV nm}$

$$= \frac{(200)^2}{2 \times 0.51 \times 10^6} \text{ eV nm}^2 \left(30 \times 25 \times 10^{27} \frac{1}{\text{m}^3} \right)$$

$$= \frac{4 \times 10^4}{10^6 \cdot 2} \text{ eV m}^2 \times 10^{-18} \underbrace{\left(750 \times 10^{27} \frac{1}{\text{m}^3} \right)^{2/3}}_{k_F} = \underline{\underline{3.3 \text{ eV}}}$$

k_F

$$T_F = E_F / k_B$$

b) He^3 ist fermionisch, mit $m = 3m_p$
Benutze $m_p c^2 = 938 \text{ MeV}$

Neutronenstern

1) Benutze $E_F = \frac{\hbar^2}{2m_n} k_F^2$ mit $k_F = (3\pi n)^{1/3}$

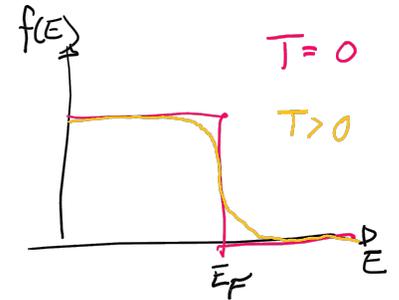
2) Finde n via $\frac{M_\odot}{m_n} = \# \text{ neutronen}$, $\frac{\# \text{ neutronen}}{V_\odot} = n$

$\hookrightarrow E_F = \frac{\hbar^2}{2m_n} \left(3\pi \frac{M_\odot}{V_\odot} \cdot \frac{1}{m_n} \right)^{2/3}$

Aber was, wenn $T \neq 0$?

Statist. Physik: $f(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{k_B T}} + 1}$ "Fermi-Dirac"

Gibt die Wahrscheinlichkeit, dass ein Zustand $\psi(E)$ bei Temperatur T besetzt ist



\Rightarrow Phänomene in Metallen werden nur von Elektronen in Nähe von E_F verursacht, weil sie die einzigen sind, die ihren Zustand ändern können

$$\text{e.g. } c_v = \frac{\pi^2 k_B^2}{3} D(E_F) = \frac{\pi^2}{2} \frac{n k_B^2}{E_F} T = \gamma T$$

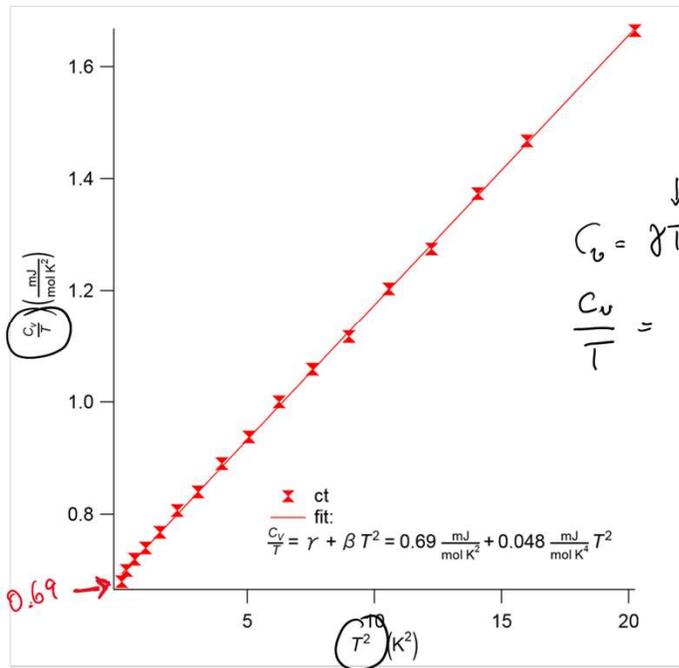
33) Spezifische Wärme von Kupfer

Versuchen Sie, aus den vorliegenden Messdaten für Kupfer (siehe Tabelle 1, $\rho = 8.94 \text{ g/cm}^3$, $m_{\text{mol}} = 63.55 \text{ g/mol}$) die Elektronenmasse zu bestimmen. Um wie viel weicht der erhaltene Wert vom Literaturwert für freie Elektronen ab?

$$n = \frac{N_A \rho}{m_{\text{mol}}} \times 1$$

T (K)	C _v (mJ mol ⁻¹ K ⁻¹)
0.25	0.17
0.50	0.35
0.75	0.54
1.00	0.74
1.25	0.96
1.50	1.21
1.75	1.47
2.00	1.78
2.25	2.11
2.50	2.50
2.75	2.91
3.00	3.35
3.25	3.91
3.50	4.46
3.75	5.15
4.00	5.87
4.50	7.49

Table 1: Spezifische Wärme von Kupfer.



$$C_v = \gamma T + \beta T^3$$

$$\frac{C_v}{T} = \gamma + \beta T^2$$

$$C_v = \frac{\pi^2}{2} n \frac{k_B^2}{E_F} T = \gamma T$$

Gesucht: m_e , nutze $E_F = \frac{\hbar^2}{2m_e} (3\pi^2 n)^{2/3}$

$$\frac{\pi^2}{2} n k_B^2 \left(\frac{2m_e}{\hbar^2} \frac{1}{[3\pi^2 n]^{2/3}} \right) T = \gamma T$$

Löse für m_e

$$m_e = \gamma \hbar^2 [3\pi^2 n]^{2/3} \cdot \frac{1}{\pi^2 n k_B^2}$$

$$= \gamma \frac{\hbar^2}{\pi^2 k_B^2} [3\pi^2]^{2/3} \cdot \frac{1}{n^{1/3}} = 1,25 \times 10^{-30} \text{ kg}$$

$$= 1,37 m_e$$

Leitfähigkeit (Th./EL.)

$$\frac{1}{\rho} = \sigma$$

Wie schnell sich Teilchen auf äusseren Reiz durch Material bewegen und
Wie viel "Leitstoff" sie dabei mittragen

Leitstoff → EL.: Ladung
→ Wärme: Kinetische Energie

$$\boxed{\vec{J} = \sigma \vec{R}} \quad \begin{array}{l} \text{Reiz} \\ \text{Leitfähigkeit} \end{array}$$

Stromdichte

Durchsch. \vec{v} : hängt von Stossprozessen & zulässigen Momentums-Zuständen ab

hängt also von durchsch. \vec{v} , Teilchendichte \rightarrow von Leitteilchen und der Leitstoffkapazität eines Teilchens ab

Th. LF von Phononen

$$J_{ph} = \frac{1}{2} C(+)$$

n , Kapazität

$$\underbrace{v_c e}_{\vec{v}} \quad \text{für } T \ll \Theta_D$$

EL. LF von Elektronen in Metallen

Drude: $J_{EL} = \sigma E = ne v_D = \frac{ne^2 \tau}{m} E$

Sommerfeld: $J_{EL} = \sigma E = \frac{ne^2 \ell}{m v_F} E$

27) Thermische Leitfähigkeit von LiF

Bestimmen Sie aus den Materialeigenschaften von LiF die thermische Leitfähigkeit als Funktion der Temperatur für $T \rightarrow 0$ und vergleichen Sie das Resultat für eine Kristallgröße von 1.06 mm mit den Literaturwerten (siehe Fig. 3).

$$\lambda = \frac{1}{3} c_v v_c \ell$$

at $T \ll \Theta_D$:

$$c_v = \frac{C_D}{V} = \frac{12}{5} \pi^4 k_B \frac{N}{V} \left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3$$

$$\frac{N}{V} = n = 2 \times N_A \int \frac{1}{m^*}$$

2x: Weil LiF aus 2 Atomen besteht

↳ Für Phononen totales N wichtig

$$v_c = \sqrt{\frac{E}{\rho}}$$

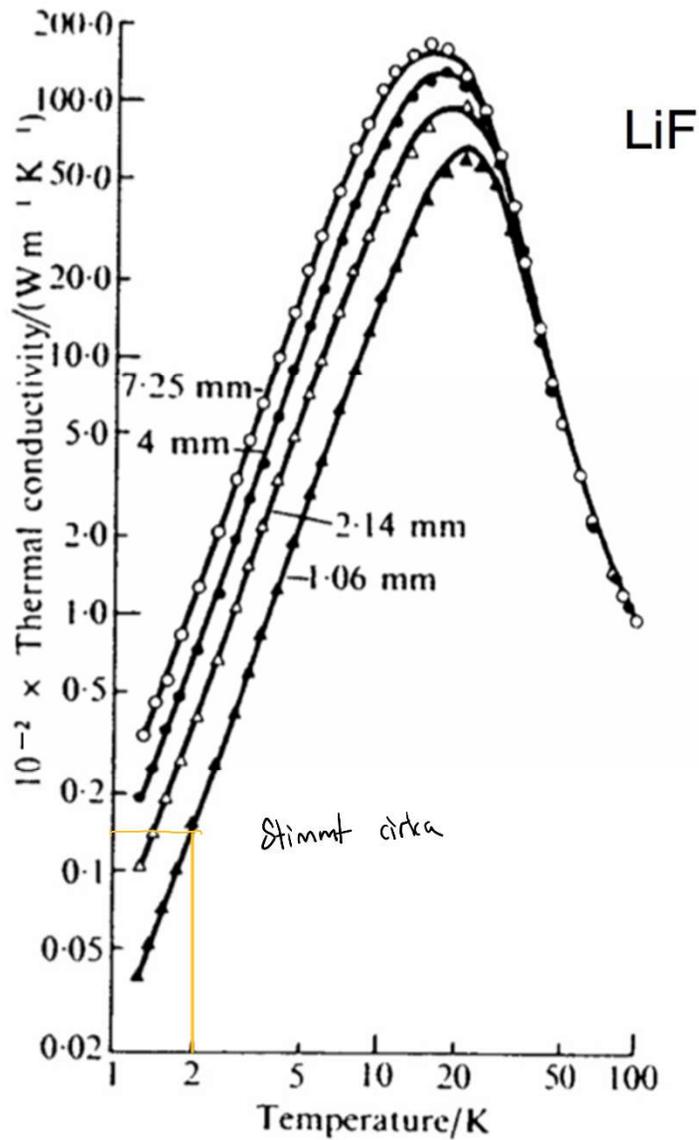
ℓ = crystal length für $T \rightarrow 0$

Chemical Formula	LiF
Crystal Class	Cubic
Lattice Constant, Å	4.03
Molecular Weight	25.94
Density, g/cm ³ (20 °C)	2.60
Reflection Loss, % for two surfaces at 4 μm	4.4
Dielectric Constant for 10 ² -10 ¹⁰ Hz at 298 K	9.0
Melting Temperature, K	1140
Thermal Conductivity, W/(m K) at 314 K	11.3
Thermal Expansion, 1/K at 300 K	34.4 x 10 ⁻⁶
Specific Heat, cal/(g K) at 283 K	0.37
Debye Temperature, K	732
Bandgap, eV	13.6
Solubility, g/100 g H ₂ O at 291 K	0.27
Knoop Hardness, kg/mm ²	100
Young's Modulus, GPa	64.77
Apparent Elastic Limit, MPa	11.2
Shear Modulus, GPa	55.12
Bulk Modulus, GPa	62.0
Poisson Ratio	0.326

$$\lambda = \frac{1}{3} \sqrt{\frac{E}{\rho}} \left(\frac{12}{5} \pi^4 k_B n_{ph} \right) \ell \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^3$$

Für $T = 2\text{K}$ erhält man ca.

$$\lambda = 14 \text{ W/mK}$$



Note:

- Bei $T < 10\text{K}$ hat Probengröße direkten einfluss auf λ
 \hookrightarrow wegen mittlerer Weglänge
- Bei $T > 10\text{K}$ kommen andere streuprozesse dazu

34) Driftgeschwindigkeit, Fermi-Geschwindigkeit und Restwiderstand in Kupfer

a) Wie gross ist die Driftgeschwindigkeit der Leitungselektronen in Kupfer ($\rho = 8.94 \text{ g/cm}^3$, $m_{\text{mol}} = 63.55 \text{ g/mol}$, 1 Leitungselektron pro Atom), wenn durch einen Draht von 1 mm Durchmesser ein Strom von 10 A geleitet wird? Wie gross ist die Fermi-Geschwindigkeit im Vergleich dazu?

b) Wie gross ist die mittlere freie Weglänge in Kupfer bei Zimmertemperatur mit einem spezifischen Widerstand von $1.7 \times 10^{-8} \Omega \text{m}$?

c) Kupfer mit 3.3 Atomprozenten Nickel als Verunreinigung besitzt einen Restwiderstand von ca. $4 \times 10^{-9} \Omega \text{m}$. Wie gross ist der mittlere Abstand der Ni-Atome im Vergleich zur mittleren freien Weglänge der Elektronen bei $T = 0$?

2.75	2.91
3.00	3.35
3.25	3.91
3.50	4.46
3.75	5.15
4.00	5.87
4.50	7.49

Table 1: Spezische Wärme von Kupfer.

$$a) \quad I = JA \quad J = nev_D \quad \rightarrow \quad v_D = \frac{1}{ne} \cdot \frac{I}{A}$$

$$n_e = 1 \times \frac{N_A \rho}{m_{\text{mol}}} \quad (\text{Kupfer hat 1 Valenzelektron})$$

$$v_F = \frac{\hbar k_F}{m_e} = \frac{\hbar}{m_e} (3\pi n)^{1/3}$$

$$v_D = 9.36 \times 10^{-4} \text{ m/s} \quad v_F = 1.57 \times 10^6 \text{ m/s}$$

$$b) \quad \text{Sommerfeld: } \sigma = \frac{ne^2 \ell}{v_F m_e}$$

$$\frac{1}{\sigma} = \rho = \frac{v_F m_e}{ne^2 \ell}$$

$$\hookrightarrow \ell = \frac{v_F m_e}{ne^2 \rho} = 38.6 \text{ nm}$$

$$c) \quad \ell = \frac{v_F m_e}{ne^2 \rho_0} = \underline{16.4 \text{ nm}}$$

• Atomdichte = n_c b/c 1 e^- pro Atom

$$\text{Nickeldichte} = 0.033 n_e = \frac{1}{L^3}$$

$$\hookrightarrow d = \frac{1}{[0.033 n_e]^{1/3}} = \underline{0.7 \text{ nm}}$$