

4. Elektronen im Metall - Sommerfeld Theorie (1933)

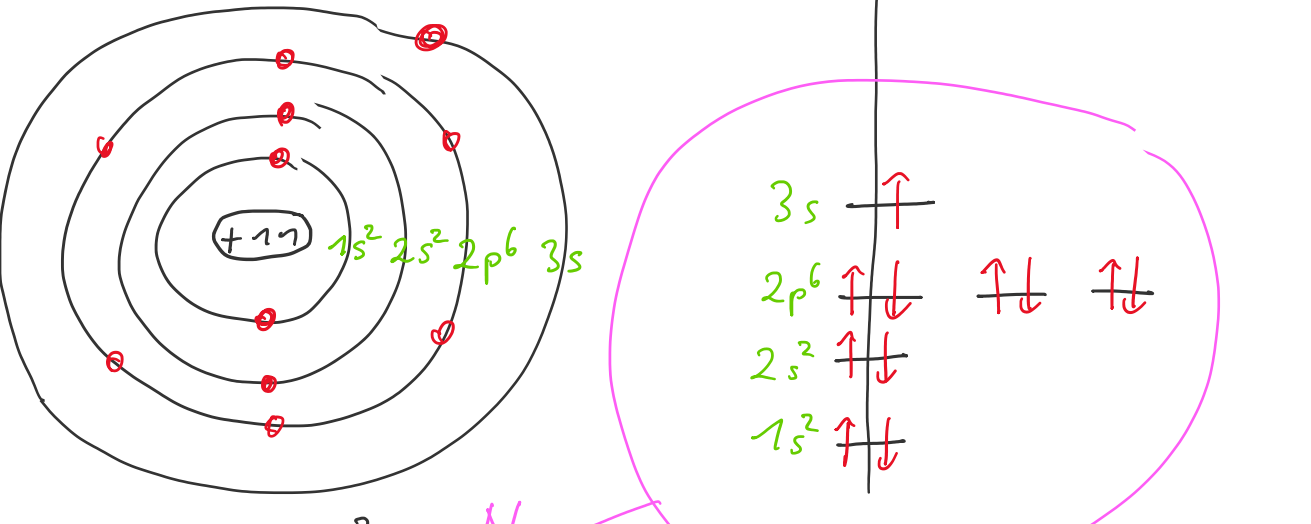
- 1925: **Pauli-Prinzip** (Ausschließungsprinzip): zwei Elektronen können nicht im selben Quantenzustand sein
- 1926: **Fermi-Dirac Statistik**
- Sommerfeld benutzte diese Entdeckungen

4.1 Fermi-Dirac Statistik

- freie Elektronen
- Pauli-Prinzip
- chemische Potential μ
- Fermi-Verteilung

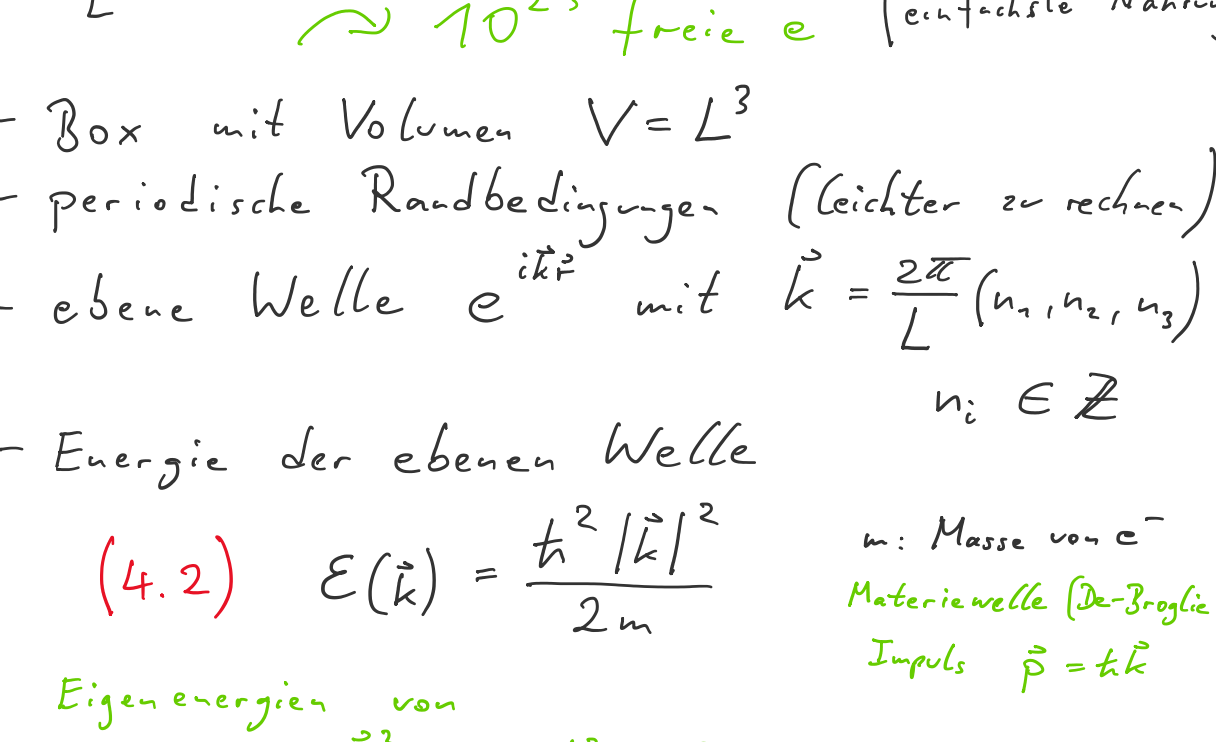
$$n_F(\beta(E-\mu)) = \frac{1}{e^{\beta(E-\mu)} + 1} \quad (4.1)$$

Wahrscheinlichkeit, daß ein Eigenzustand mit Energie E besetzt ist



- für $T \rightarrow 0 \rightarrow$ Stufenfunktion

- Beispiel: Na $11e^-$



$\sim 10^{23}$ freie e^- (einfachste Näherung)

- Box mit Volumen $V=L^3$
- periodische Randbedingungen (leichter zu rechnen)
- ebene Welle e^{ikx} mit $k = \frac{2\pi}{L}(n_1, n_2, n_3)$

- Energie der ebenen Welle

$$(4.2) \quad E(k) = \frac{\hbar^2 |k|^2}{2m}$$

Eigenenergien von

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Rightarrow \dots$$

m : Masse von e^-
Materiewelle (De-Broglie-Relation)
Impuls $\vec{p} = \hbar \vec{k}$

- Gesamtzahl von e^- im System

$$N = 2 \sum_k n_F(\beta(E(k)-\mu)) \rightarrow 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3k n_F(\beta(E(k)-\mu)) \quad (4.3)$$

$\uparrow$ zwei Spinzustände

- oft ist N bekannt $\Rightarrow$ Gleichung definiert das chemische Potential

Def. E_F : Fermi-Energie, Fermi-Niveau

E_F ist das chemische Potential bei $T=0$

Fermi-See: alle besetzten Zustände bei $T=0$

$\Rightarrow$ neben Phy.-Hochhaus

Fermi-Temperatur: $T_F = \frac{E_F}{k_B}$

Fermi-Wellenvektor: k_F $E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$ (4.4)

Fermi-Impuls: $p_F = \hbar k_F$

Fermi-Geschwindigkeit: $v_F = \hbar k_F / m$ (4.5)

Berechnung der Fermi-Energie

bei $T=0$ wird die Fermi-Verteilung eine Stufenfunktion

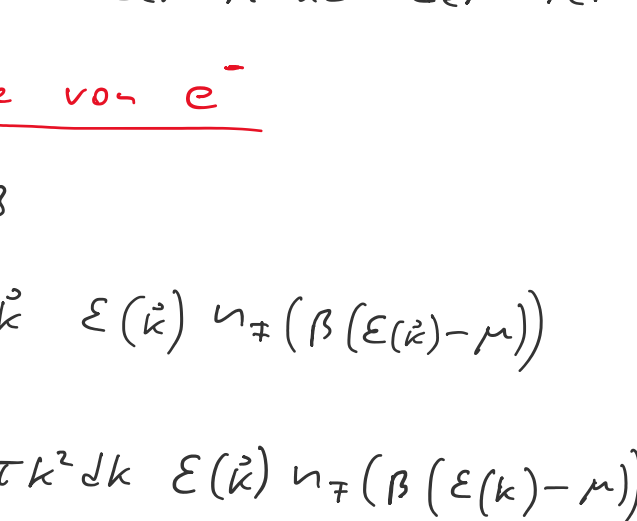
$$\Theta(x) = \begin{cases} 1 & \text{für } x \geq 0 \\ 0 & \text{für } x < 0 \end{cases} \quad |k| < k_F$$

mit (4.3)

$$N = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3k \Theta(E_F - E(k)) = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3k$$

$$= 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \left(\frac{4}{3} \pi k_F^3 \right) \quad (4.6) \quad \text{Kugelintegral}$$

Fermi-Kugel:



- mit Dichte $n = \frac{N}{V}$

$$(Eq. 4.6) \Rightarrow k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}$$

$$E_F = \frac{\hbar^2 (3\pi^2 n)^{2/3}}{2m} \quad (4.7)$$

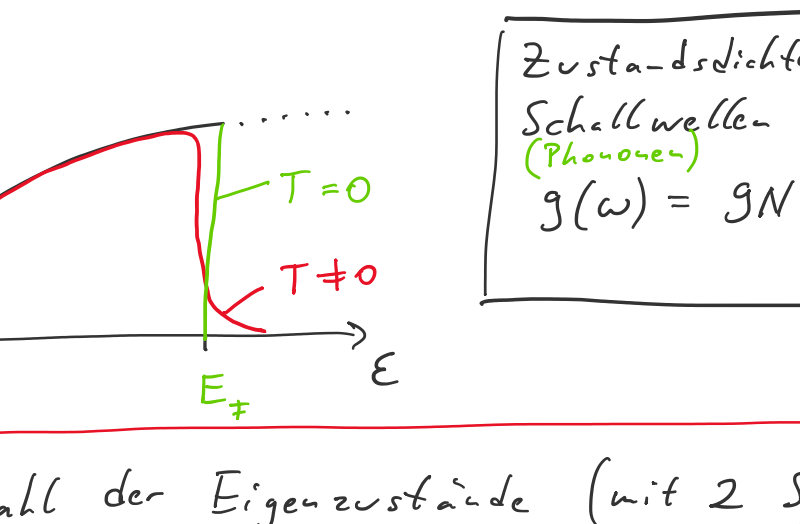
Beispiel: Kupfer hat ein freies Elektron pro Atom

$$\Rightarrow E_F \approx 7 \text{ eV} \approx 80000 \text{ K}$$

- für alle Metalle: $T_F \gg 300 \text{ K}$

$$v_F \approx 1\% c \quad (\text{Lichtgeschwindigkeit})$$

- da der Fermi-See so tief ist, kann die T nur e^- in der Nähe der Fermi-Fläche anregen



- spez. Wärme von e^- ist sehr klein, da nur sehr wenige e^- angeregt werden können

- im Kontrast zum Drude-Modell, wo alle e^- die Energie $\frac{3}{2} k_B T$ haben

- Anregungen nur in der Nähe der Fermi-Fläche

4.2 Spez. Wärme von e^-

- analog zu Eq. 4.3

$$E_{\text{total}} = \frac{2V}{(2\pi)^3} \int d^3k E(k) n_F(\beta(E(k)-\mu))$$

$$= \frac{2V}{(2\pi)^3} \int_0^{\infty} 4\pi k^2 dk E(k) n_F(\beta(E(k)-\mu))$$

- das chemische Potential ist definiert durch

$$N = \frac{2V}{(2\pi)^3} \int d^3k n_F(\beta(E(k)-\mu))$$

$$= \frac{2V}{(2\pi)^3} \int_0^{\infty} 4\pi k^2 dk n_F(\beta(E(k)-\mu))$$

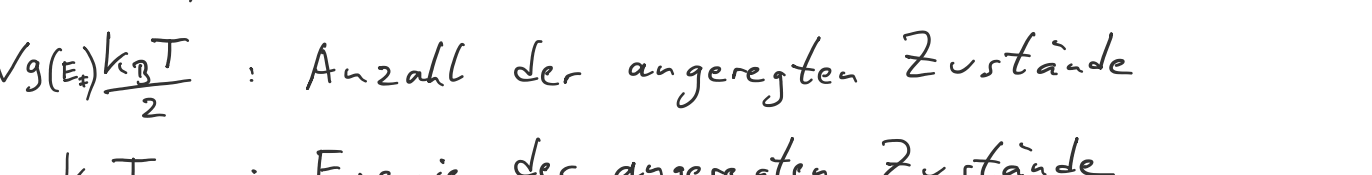
- mit $k = \sqrt{\frac{2Em}{\hbar^2}}$ und $dk = \sqrt{\frac{m}{2E}} dE$

$$E_{\text{total}} = V \int_0^{\infty} dE E g(E) n_F(\beta(E-\mu)) \quad (4.8)$$

$$N = V \int_0^{\infty} dE g(E) n_F(\beta(E-\mu)) \quad (4.9)$$

$$\text{wo } g(E) dE = \frac{2}{(2\pi)^3} 4\pi k^2 dk = \frac{2}{(2\pi)^3} 4\pi \frac{2Em}{\hbar^2} \sqrt{\frac{m}{2E}} dE$$

$$g(E) dE = \frac{(2m)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} E^{1/2} dE \quad (4.10)$$



$$g(\omega) = \frac{3N}{2\pi^2} \frac{\omega^2}{v_F^3} \quad (2.5)$$

$g(E) dE$: Anzahl der Eigenzustände (mit 2 Spin-Richtungen) zwischen der Energie E und $E+dE$

- mit Eq. 4.7 $\Rightarrow (2m)^{3/2} / \hbar^3 = 3\pi^2 n / E_F^{3/2}$

$$\Rightarrow g(E) = \frac{3n}{2 E_F} \left(\frac{E}{E_F} \right)^{1/2} \quad (4.11)$$

- Einheit $\frac{1}{[V][E]}$

- Eq. 4.9 definiert das chemische Potential für eine Anzahl N von e^- und T

- sobald μ fixiert ist gibt Eq. 4.8 die Gesamtenergie

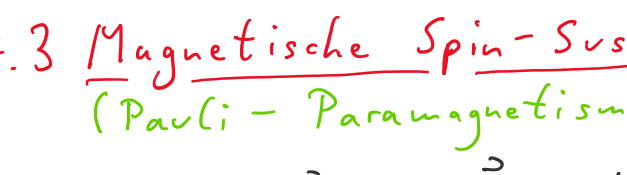
- $\frac{\partial E_{\text{total}}}{\partial T}$ würde die spez. Wärme geben, aber analytisch nicht möglich

- jedoch ist $T \ll T_F \rightarrow$ Fermi-Verteilung ist nahe an Stufenfunktion

- Näherung:

$$\mu(T) = E_F + O\left(\frac{T}{T_F}\right)^2 \quad (\text{Ashcroft and Mermin Chap. 2})$$

$$\mu(T) \approx E_F$$



$$Eq. 4.8 \Rightarrow E_{\text{total}} = E_{\text{total}}(T=0) + \frac{V}{2} [V g(E_F) k_B T] (k_B T) + \dots$$

$g(E_F)$: Zustandsdichte pro Volumen für E_F

$V g(E_F) \frac{k_B T}{2}$: Anzahl der angeregten Zustände

$k_B T$: Energie der angeregten Zustände

$\tilde{g} = \frac{\pi^2}{3}$: siehe Ashcroft and Mermin

$$\Rightarrow C = \frac{\partial E}{\partial T} = \tilde{g} k_B g(E_F) V k_B T$$

$$\text{mit Eq. 4.11} \quad C = \tilde{g} \left(\frac{3N k_B}{2} \right) \left(\frac{T}{T_F} \right) \quad (4.12)$$

wie ideales Gas ≈ 0.01

- wir haben den gewünschten Term: $C \sim T$

Sommerfeldkonstante

$$\gamma = \frac{\pi^2}{3} \cdot \frac{3N k_B}{2} \cdot \frac{1}{T_F} \Rightarrow \gamma = \frac{\pi^2 N k_B}{2 T_F}$$

	γ_{exp}	γ_{th}
Li	18	$7.4 \cdot 10^{-4} \text{ J/molK}$
Na	15	11
K	20	17
Cu	7	5.0
Ag	7	6.4
Be	2	2.5
Bi	1	5.0
Mn	170	5.2

• Sommerfeld Theorie nicht so schlecht

• effektive Masse $\Rightarrow$ Bandtheorie

• Drude Theorie, Eq. 3.5-3.7

Seebeck (Thermopower)

$$S = \frac{\pi}{T} = - \frac{C_V}{3e} \quad \text{war 100 mal zu groß}$$

$$\text{da } \frac{T_F}{T} \approx 100$$

$\sim$ Seebeck Koeff. besser beschrieben

- thermische Leitfähigkeit (Drude)

$$\chi = \frac{1}{3} n C_V \langle v \rangle \lambda$$

Sommerfeld: $\uparrow$ 100 mal kleiner $\uparrow$ 100 mal größer

4.3 Magnetische Spin-Suszeptibilität (Pauli-Paramagnetismus)

$$\vec{M} = \frac{\chi}{\mu_0} \vec{B} \quad \vec{M}: \text{Magnetisierung}$$

μ_0 : Permeabilität

χ : Suszeptibilität

Spin-Hamilton

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m_e} + g \mu_B \vec{S} \cdot \vec{B} \quad \vec{S}: \text{Spin}$$

$\vec{p}^2$: kinetische E

$g \mu_B \vec{S} \cdot \vec{B}$: Zeeman-Term

g : g-Faktor, $g=2$ für e^-

$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$ Bohrscher Magneton

Verzeichen: Spin ist antiparallel zum $\vec{B}$ -Feld!

Definition von Benjamin Franklin, der behauptete, daß die Ladung auf den Seitenrand positiv ist, wenn er es an einen Glasstab reibt

Impuls

$$\vec{p} = m \vec{v} + q \vec{A}$$

$\uparrow$ vernachlässigen wir hier

$\sim$ vernachlässigen den Landau-Diamagnetismus

$$\chi_{\text{Landau}} = -\frac{1}{3} \chi_{\text{Pauli}}$$

- Elektronen spin hat die Eigenwerte $\pm \frac{1}{2}$

$$\vec{S} = |\vec{S}|$$

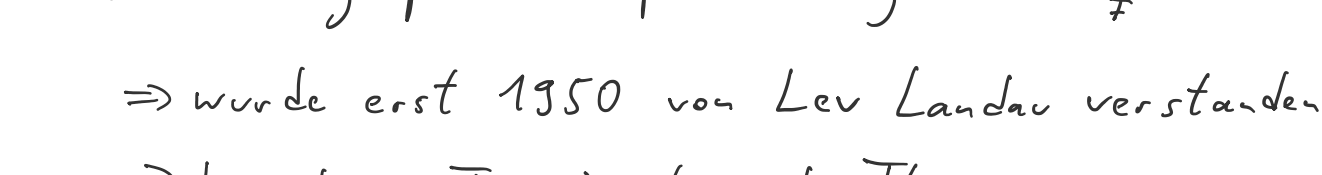
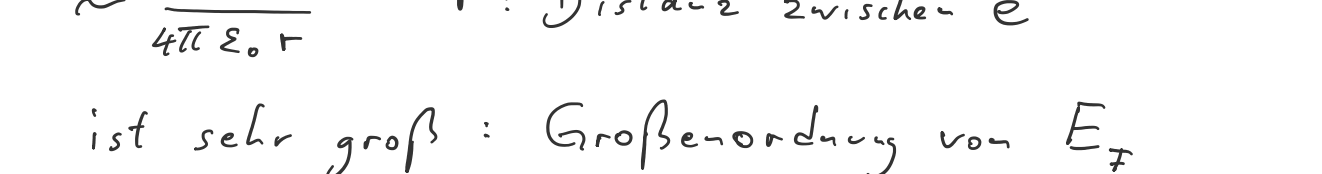
$$E(\vec{k}, \uparrow) = \frac{\hbar^2 |k|^2}{2m} + \mu_B B \quad \left\{ \begin{array}{l} g=2 \\ \uparrow = +\frac{1}{2} \\ \downarrow = -\frac{1}{2} \end{array} \right\} = 1$$

$$E(\vec{k}, \downarrow) = \frac{\hbar^2 |k|^2}{2m} - \mu_B B$$

- Magnetisierung (mag. Moment pro Volumen)

$$M = - \frac{1}{V} \frac{dE}{dB} = - \left(\text{Anzahl von } \uparrow - \text{Anzahl von } \downarrow \right) \frac{\mu_B}{V} \quad (4.13)$$

Absehtzung des Pauli-Paramagnetismus



$$\text{für } B=0 \quad g_{\uparrow}(E) = g_{\downarrow}(E) = \frac{1}{2} g(E)$$

$$\frac{g(E_F)}{2} \cdot \mu_B B \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{mehr Spins nach unten} \\ \text{weniger Spins nach oben} \end{array} \right.$$

- mit (4.13) $\Rightarrow M = g(E_F) \mu_B^2 B$

- Magnetische Suszeptibilität $\chi = \lim_{H \rightarrow 0} \frac{\partial M}{\partial H}$

- für $T=0$

$$\chi_{\text{Pauli}} = \frac{dM}{dH} = \mu_0 \frac{dM}{dB} = \mu_0 \mu_B^2 g(E_F) \quad (4.14)$$

4.4 Warum ist die Drude Theorie so gut?

- freie e^- sind kein e^- -Gas, da Fermionen $\sim$ Fermi-Dirac Statistik

- e^- -Gas überschätzt die spez. Wärme und unterschätzt die e^- -Geschwindigkeit } Faktor 100

- trotzdem konnten wir den Hall-Effekt gut erklären

- die Annahme, daß $\vec{p}=0$ nach Streuung ist verkehrt, da ja alle Zustände kleiner Energie besetzt sind

- Drude war für ein e^-

- Wir können aber die selbe Theorie mit dem ganzen Fermi-See machen

- ohne E-Feld: mittlere Geschwindigkeit ist null

- für E-Feld < 0 , Fermi-See verschiebt sich nach rechts mit $k_{\text{drift}} = \frac{m}{\hbar} v_{\text{drift}}$

- Streuung der e^- in der Nähe der Fermi-Fläche $\Rightarrow$ Streuung sehr "stark"

4.5 Mängel des freien e^- Modells von Sommerfeld

- Streuränge $\lambda = v_F \tau \approx 10 \text{ nm}$ bei 300 K

$$\approx 1 \text{ nm}$$

Warum so wenige Streuungen, da Atome alle $3\text{\AA}$?

- Was ist der Einfluß aller e^- der Atome?

- Hall-Effekt hat manchmal ein anderes Vorzeichen

- optische Eigenschaften nicht beschrieben warum haben Gold, Silber, Kupfer verschiedene Farben?

- spez. Wärme ist besser als bei Drude Theorie, aber manchmal Abweichungen bis Faktor 10

- effektive Masse oft $\neq m_e$

- Magnetismus wie Fe nicht beschrieben

- e^-e^- -Wechselwirkung vernachlässigt!

$$\sim \frac{e^2}{4\pi \epsilon_0 r} \quad r: \text{Distanz zwischen } e^-$$

ist sehr groß: Größenordnung von E_F

$\Rightarrow$ wurde erst 1950 von Lev Landau verstanden

$\Rightarrow$ Landau-Fermi-Liquid Theory

(zu schwierig für Phy. V (II))

- alle Mängel kommen von der Vernachlässigung der mikroskopischen Struktur