

#### 4. Elektronen im Metall - Sommerfeld Theorie (1933)

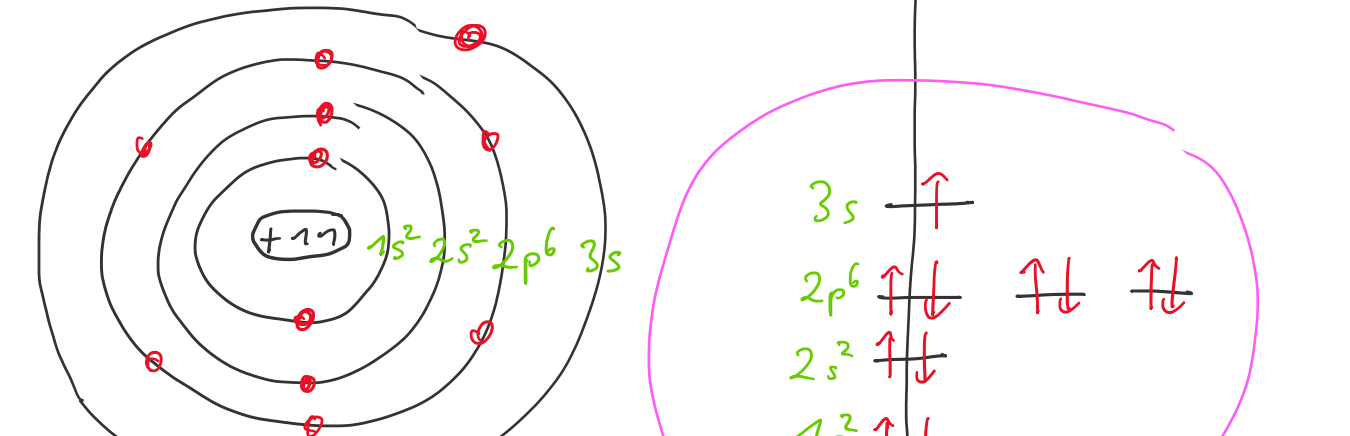
- 1925: **Pauli-Prinzip** (Ausschließungsprinzip):  
zwei Elektronen können nicht im selben Quantenzustand sein
- 1926: **Fermi-Dirac Statistik**
- Sommerfeld benutzte diese Entdeckungen

#### 4.1 Fermi-Dirac Statistik

- freie Elektronen
- Pauli-Prinzip
- chemische Potential  $\mu$
- Fermiverteilung

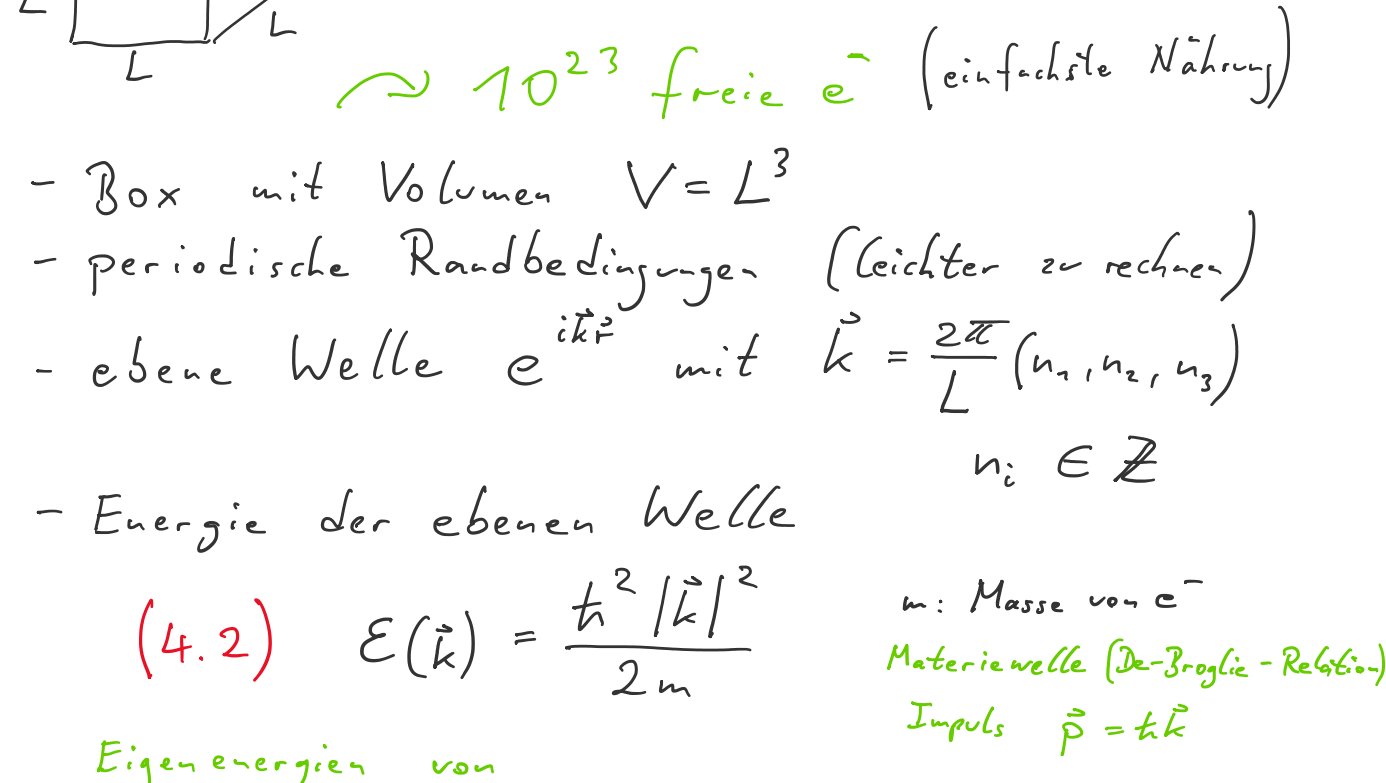
$$n_{\uparrow}(\beta(E-\mu)) = \frac{1}{e^{\beta(E-\mu)} + 1} \quad (4.1)$$

Wahrscheinlichkeit, daß ein Eigenzustand mit Energie  $E$  besetzt ist



- für  $T \rightarrow 0 \leadsto$  Stufenfunktion

- Beispiel: Na  $11e^-$



- Box mit Volumen  $V=L^3$

- periodische Randbedingungen (leichter zu rechnen)

- ebene Welle  $e^{ikx}$  mit  $\vec{k} = \frac{2\pi}{L}(n_1, n_2, n_3)$

- Energie der ebenen Welle

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

Eigenenergien von  $H_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m}$

- Gesamtzahl von  $e^-$  im System

$$N = 2 \sum_{\vec{k}} n_{\uparrow}(\beta(\epsilon(\vec{k})-\mu)) \rightarrow 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\vec{k} n_{\uparrow}(\beta(\epsilon(\vec{k})-\mu)) \quad (4.3)$$

- 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

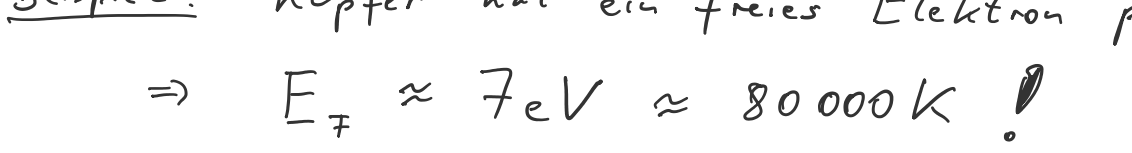
- bei  $T=0$  wird die Fermiverteilung eine Stufenfunktion

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

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

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

Fermi-Kugel:



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

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

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

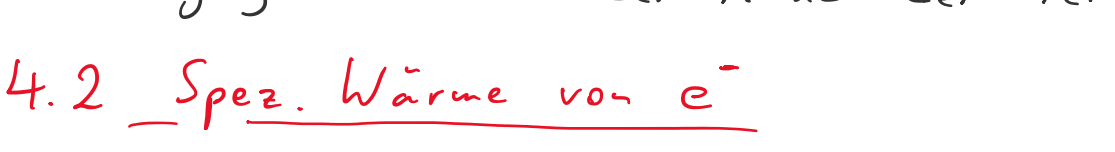
Beispiel: Kupfer hat ein freies Elektron pro Atom

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

- 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

$$E_{\text{total}} = \frac{2V}{(2\pi)^3} \int d\vec{k} \epsilon(\vec{k}) n_{\uparrow}(\beta(\epsilon(\vec{k})-\mu))$$

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

- das chemische Potential ist definiert durch

$$N = \frac{2V}{(2\pi)^3} \int d\vec{k} n_{\uparrow}(\beta(\epsilon(\vec{k})-\mu))$$

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

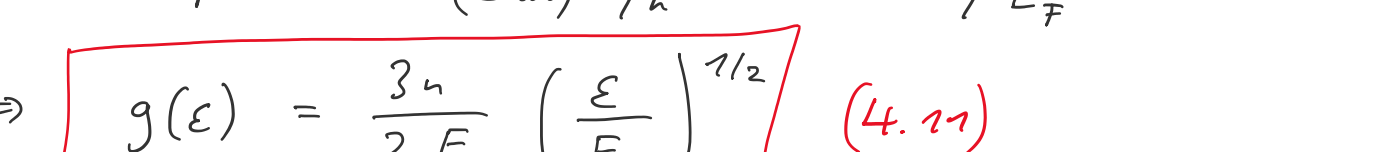
- mit  $k = \sqrt{\frac{2Em}{\hbar^2}}$  und  $dk = \sqrt{\frac{m}{2E}} dE$

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

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

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

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



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

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

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

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

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

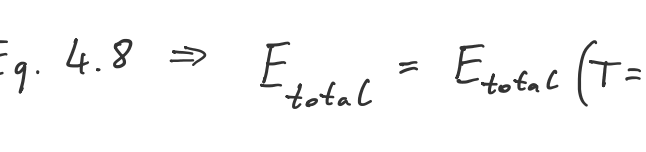
- sobald  $\mu$  fixiert ist gibt Eq. 4.8 die Gesamtenergie

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

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

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

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



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

$g(E_F)$ : 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

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

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

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

wie ideales Gas  $\approx 0.01$

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

#### Sommerfeldkonstante

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

Li	18	$7.4 \cdot 10^{-4} \text{ J/molK}$	• Sommerfeld Theorie nicht so schlecht
Na	15	11	• effektive Masse $\Rightarrow$ Bandtheorie
K	20	17	
Cu	7	5.0	
Ag	7	6.4	• Drude Theorie, Eq. 3.5-3.7
Be	2	2.5	Seebeck (Thermopower)
Bi	1	5.0	$S = \frac{\pi}{T} = -\frac{C_V}{3e}$ war 100mal zu groß
Mn	170	5.2	

da  $\frac{T_F}{T} \approx 100$   
 $\leadsto$  Seebeck Koeff. besser beschrieben

- thermische Leitfähigkeit (Drude)

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

Sommerfeld: 100 mal kleiner 100 mal größer

#### 4.3 Magnetische Spin-Suszeptibilität (Pauli-Paramagnetismus)

$$\vec{M} = \frac{\chi}{\mu_0} \vec{B}$$

$\vec{M}$ : Magnetisierung  
 $\mu_0$ : Permeabilität  
 $\chi$ : Suszeptibilität

Spin-Hamilton  $\vec{\sigma}$ : Spin  
 $\mathcal{H} = \frac{\vec{p}^2}{2m_e} + g \mu_B \vec{\sigma} \cdot \vec{B}$   
kinetische E.  $\uparrow$  Zeeman-Term  $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$  Bohrscher Magneton

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

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

**Impuls**  $\vec{p} = m \vec{v} + q \vec{A}$   
 $\leadsto$  vernachlässigen wir hier  
 $\leadsto$  vernachlässigen den Landau-Diamagnetismus  
 $\chi_{\text{Landau}} = -\frac{1}{3} \chi_{\text{Pauli}}$

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

- $B = |\vec{B}|$

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

- Magnetisierung (mag. Moment pro Volumen)

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

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  $T=0$

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

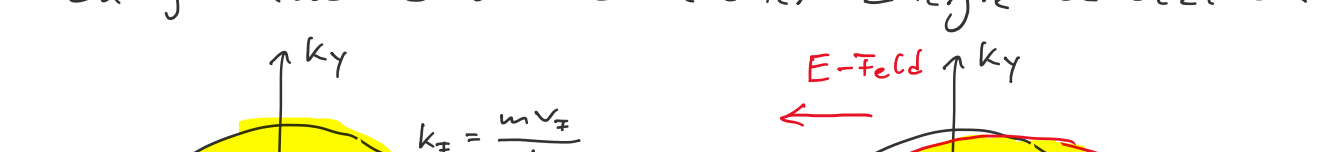
#### 4.4 Warum ist die Drude Theorie so gut?

- freie  $e^-$  sind kein  $e^-$ -Gas, da Fermionen  $\leadsto$  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



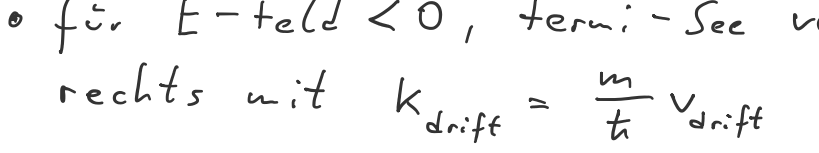
- Drude war für ein  $e^-$

- 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 300K

$$\approx 1 \text{ nm} \text{ bei } T=0$$

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 (c))

- alle Mängel kommen von der Vernachlässigung der mikroskopischen Struktur