

Merkpunkte Kapitel 2: Elektronen in Festkörpern

Ohmsches Gesetz

$$I \propto U = \frac{1}{R} \cdot U$$

besser:

$$\underline{j} = \sigma \underline{E}$$

Elektrischer Strom j_e = *mechanischer* Strom j_T geladener Teilchen

$$j_e = q \cdot j_T$$

q = Ladung
des Teilchens

$$j_T = \frac{\text{Zahl Teilchen } N \text{ pro Fläche } F \text{ und Zeit } t}{F \cdot t} = \frac{N}{F \cdot t}$$

Es zählt nur der **Nettostrom** = Differenz der Teilströme. Der Nettostrom ist bestimmt durch die Driftgeschwindigkeit v_D

$$j = q \cdot n \cdot v_D$$

Damit ergibt sich die "Mastergleichung" für die **Leitfähigkeit**; μ ist der Materialparameter "Beweglichkeit" = v_D/E

$$\sigma = q \cdot n \cdot \mu$$

Die Existenz einer konstanten Driftgeschwindigkeit trotz einer konstante Kraft erfordert die Existenz von "Reibung" = **Stöße** im Mikroskopischen.

● Stoßpartner für die Elektronen sind **Phononen**, Kristallgitterdefekte und andere Elektronen.

● Die entscheidenden Parameter sind die mittlere **Stoßzeit** τ und die damit verknüpfte mittlere freie Weglänge l

● Es ergeben sich die nebenstehenden Beziehungen.

$$v_D = - \frac{E \cdot e \cdot \tau}{m}$$

$$I = 2T(v_0 + v_D)$$

$$\mu = \frac{v_D}{E} = \frac{e \cdot \tau}{m}$$

$$\sigma = \frac{n \cdot e^2 \cdot \tau}{m} = \frac{n \cdot e^2 \cdot l}{2 \cdot m \cdot (v_0 + v_D)}$$

Die mittlere thermische Geschwindigkeit v_0 folgt aus der klassischen Thermodynamik:

$$E = E_{\text{kin}} = \frac{1}{2} m \cdot v_0^2 = \frac{3}{2} kT$$

$$v_0 = \left(\frac{3 kT}{m} \right)^{1/2}$$

Für Metalle mit bekannter Konzentration n der Elektronen und gemessenen Leitfähigkeiten lassen sich die interessanten Größen ausrechnen; man erhält

- Das kann nicht stimmen - insbesondere l ist viel zu klein!

Offenbar ist Quantentheorie erforderlich!

- Der **Hall Effekt** betrachtet Stromfluß im Magnetfeld B_z . Bei orthogonaler Geometrie wird senkrecht zu E_x und B_z eine Hallspannung E_y · **Breite** induziert.
- Damit sind Beweglichkeiten direkt meßbar; das Vorzeichen der Hallkonstante gibt direkt das Vorzeichen der fließenden Ladungen.
- Gelegentlich findet man *positive* Ladungen; klassisch nicht erklärbar. *Offenbar ist Quantentheorie erforderlich!*

Näherung (= Modell) des *freien Elektrongases*

Ergebnis: Welle mit Amplitude $(1/L)^{3/2}$

Aufenthaltswahrscheinlichkeit überall gleich! Das Elektron ist "ausgeschnürt".

Entscheidende Größe ist der Wellenvektor $\underline{k}$. Er bestimmt direkt:

- Die "Nummer" (= Quantenzahlsatz) der Lösung.
- Den Impuls $\underline{p} = \hbar \underline{k}$.
- Die Gesamtenergie $E \propto \underline{k}^2$.
- Die Wellenlänge $\lambda = 2\pi/k$.

Die Energie ist bezüglich der Quantenzahlen entartet. Die Zustandsdichte $D(E)$ mißt, wieviel Zustände ΔN_e sich in einem Energieintervall ΔE und im Volumen V befinden.

- Die Zustandsdichte ist über Abzählen im Phasenraum (= Raum der Wellenvektoren) leicht zu berechnen.

$$v_0 \approx 5 \cdot 10^4 \text{ m/s}$$

$$\tau \approx 4 \cdot 10^{-14} \text{ s}$$

$$v_D \approx 6 \cdot 10^{-1} \text{ m/s}$$

$$l \approx 3 \text{ nm}$$

$$E_y = -\mu \cdot E_x \cdot B_z = R_{\text{Hall}} \cdot B_z \cdot j_x$$

$$R_{\text{Hall}} = \pm \frac{\mu}{\sigma}$$

Nur *ein* Elektron; Potential $V = \text{const} = 0$ im Kristall der Länge L ; periodischen Randbedingungen

$$\psi(\underline{r}) = \left(\frac{1}{L}\right)^{3/2} \cdot \exp(i \cdot \underline{k} \cdot \underline{r})$$

$$\psi \cdot \psi^* = 1/L^3$$

$$k_x = \pm \frac{n_x \cdot 2\pi}{L} \quad k_y = \pm \frac{n_y \cdot 2\pi}{L} \quad k_z = \pm \frac{n_z \cdot 2\pi}{L}$$

$$\Delta N_e = D(E) \cdot \Delta E \cdot V$$

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

Beim Auffüllen der Zustände mit Elektronen (bei $T = 0 \text{ K}$), wird bei einer definierten Energie - der Fermienergie E_F - das letzte Elektron untergebracht sein.

Für eine bekannte Elektronendichte n_e ist die Fermienergie leicht berechenbar.

Zustandsdichte und Fermienergie sind für die elektronischen Eigenschaften *realer* Kristalle die wichtigsten Kenngrößen überhaupt! Sie sind immer noch wohl definiert, auch wenn die einfachen Modellformeln des freien Elektronengases für reale Kristalle modifiziert werden müssen!

Fermi-Dirac Verteilungsfunktion

Damit Wahrscheinlichkeit für *Nicht*besetzung

Die "Fermi Verteilung" oder "Fermi Statistik" hat die nebenstehende Gestalt:

$f(E, E_F, T)$ ist eine *universelle* Funktion die für alle fermionischen Systeme im thermodynamischen Gleichgewicht gilt

Für den "Hochenergieschwanz" darf man die Boltzmannverteilung verwenden

$f(E = E_F) = 1/2$ definiert die Fermienergie

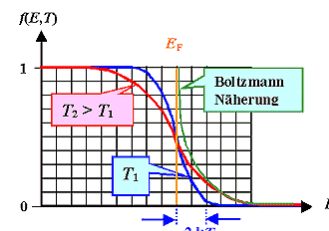
Der "Aufweichungsbereich" liegt in der Größenordnung kT

$f(E, E_F, T)$ = Wahrscheinlichkeit dafür, daß ein Platz bei der Energie E in einem System mit Fermienergie E_F und Temperatur T besetzt ist.

$$1 - f(E, E_F, T)$$

$$f(E, T) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right) + 1}$$

$$f(E, T) \approx \exp - \frac{E - E_F}{kT} \quad \text{für } E > E_F$$



Wichtige Formeln sind

n = Gesamtvolumendichte der Elektronen des Systems.

$n(E_1, E_2)$ = Volumendichte der Elektronen im gegebenen Energieintervall

$E(E_1, E_2)$ = Gesamtenergie(volumendichte) im gegebenen Energieintervall

Dies Gleichungen gelten *immer*, d.h. nicht nur für das freie Elektronengas. Im *realen* Kristall unterscheidet sich hier nur die Zustandsdichte von der des freien Elektronengases.

$$n = \int_0^{\infty} D(E) \cdot f(E, T) \cdot dE$$

$$n(E_1, E_2) = \int_{E_1}^{E_2} D(E) \cdot f(E, T) \cdot dE$$

$$E(E_1, E_2) = \int_{E_1}^{E_2} E \cdot D(E) \cdot f(E, T) \cdot dE$$

■ Molare **Wärmekapazität** Metall ist klassisch-theoretisch immer

$$C = C_e + C_{\text{Gitter}} = 6/2 \cdot R + 3/2 \cdot R = 9/2 \cdot R$$

● Das ist experimentell doppelt falsch:

1. Gitteranteil geht $\Rightarrow 0$ für $T \Rightarrow 0 \text{ K}$
2. Elektronenanteil immer $\ll 3/2 \cdot R$

● Fehler bei Elektronen: Pauli Prinzip nicht berücksichtigt

■ Richtig ist: Nur Elektronen mit freien Plätzen in der Nachbarschaft im $\underline{k}$ -raum können Energie aufnehmen.

● Das sind **nur** die Elektronen im "Aufweichungsbereich" der Fermiverteilung

!!! Sehr wichtiges Prinzip !!!

■ Richtige Formel

● Strickmuster ist immer:
Zustandsdichte mal
Fermiverteilung = Dichte
Elektronen bei E ; mal E =
gesamte Energie der
Elektronen bei E ,
Aufsummieren (= integrieren)

● Rechnerei trickreich;
braucht Näherungen.

$$E = \int_0^{\infty} E \cdot D(E) \cdot f(E, T) \cdot dE$$
$$C = dE/dT \approx D(E_F) \cdot \int_0^{\infty} (E - E_F) \cdot \frac{d}{dT} \left(\frac{1}{\exp - (E - E_F)/kT} \right) dE \approx \frac{\pi^2}{2} \cdot R \cdot \frac{T}{T_F}$$

■ Schnelle Abschätzung gibt

● Merke: Mathe kann schwierig sein, Physik ist aber klar.

$$C_e \approx \frac{9N_A}{2E_F} \cdot k^2 T = \frac{9}{2} R \cdot \frac{kT}{E_F} = \frac{9}{2} R \cdot \frac{T}{T_F}$$

■ Bei klassischer **Leitfähigkeit** ebenfalls Fehler weil kein Pauli Prinzip berücksichtigt.

● Dadurch ist die mittlere Geschwindigkeit v_0 viel zu klein

● "Reparatur" klassischer Formel: Ersetze v_0 (klassisch) durch "Fermigeschwindigkeit v_F "

● Damit größere freie Weglängen;
grundsätzliches Verständnis möglich.

$$1/2 m \cdot v_F^2 = k \cdot T_F$$

■ Genauer Betrachtung der mittleren freien Weglänge als Funktion von Temperature, Defekten, Legierung usw. ergibt die klassischen "Regeln" und "Gesetze" für die Leitfähigkeit der Metalls.

Matthiesen Regel:

$$\rho \approx \rho_0 (1 + \alpha T) \quad \alpha \approx 4 \cdot 10^{-3} \text{ K}^{-1}$$

Nordheim Regel:

$$\rho \propto \text{Konz. Legierungselement}$$

Fragebogen

Multiple Choice Fragen zu Kapitel 2