

VI.5 Magnetische Eigenschaften des freien Elektronengases

VI.5.1 Theorie

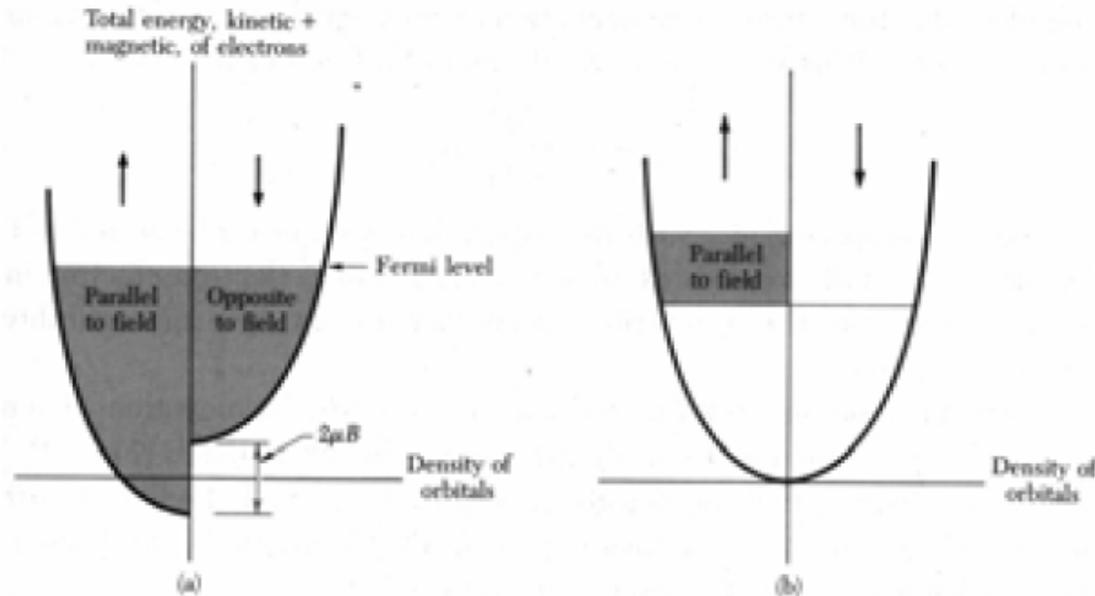
- freie Elektronen haben einen Spin → Kopplung an das Magnetfeld

→ Grundzustand ist Magnetfeldabhängig

Spin der Leitungselektronen → magnetisches Moment

$$E_{\text{pot}}^{\text{magn}} = \pm \mu_B |\mathbf{B}| \quad \text{mit } + \text{ antiparallel zu } \mathbf{B} \text{ und } - \text{ parallel zu } \mathbf{B} !$$

d.h. die Zustandsdichte spaltet auf :



N^+ Teilchenzahl mit Spin parallel zu \mathbf{B} und N^- Teilchenzahl antiparallel

Magnetisierung : $M = |M| = N^+ \mu_B - N^- \mu_B = (N^+ - N^-) \mu_B$

Anschaulich : die parallelen Zustände werden günstiger

Wieviele Teilchen werden umverteilt?

$$(N^+ - N^-) = D^+(E_F) 2 \mu_B B = 0.5 D(E_F) 2 \mu_B B = D(E_F) \mu_B B$$

((Achtung : hier ist $D(E) = D^+(E) + D^-(E)$ bei $B=0$))

Damit ergibt sich die Magnetisierung : $M = \mu_B^2 D(E_F) B$

bei freien Elektronen gilt : $D(E_F) = 3/2 \cdot N/E_F$

damit : $M = 3/2 \cdot \mu_B^2/E_F \cdot N \cdot B$ Pauli'scher Paramagnetismus

-die magnetische Suszeptibilität : $\chi = 1/V \cdot M/B$ Volumensuszeptibilität

$$\chi_{\text{Pauli}} = \mu_B^2 D(E_F) \quad (6.28) \quad \text{allgemein (von der Bandstruktur bestimmt)}$$

Und für freie Elektronen : $\chi_{\text{Pauli}} = 3/2 \mu_B^2 n/E_F \quad (6.29)$

-bei endlichen Temperaturen ergibt sich über $\mu(T)$ eine schwache

$$\text{Temperaturabhängigkeit } \chi_{\text{Pauli}}(T) = \chi_{\text{Pauli}}(0) [1 - \pi^2/12 (T/T_F)^2]$$

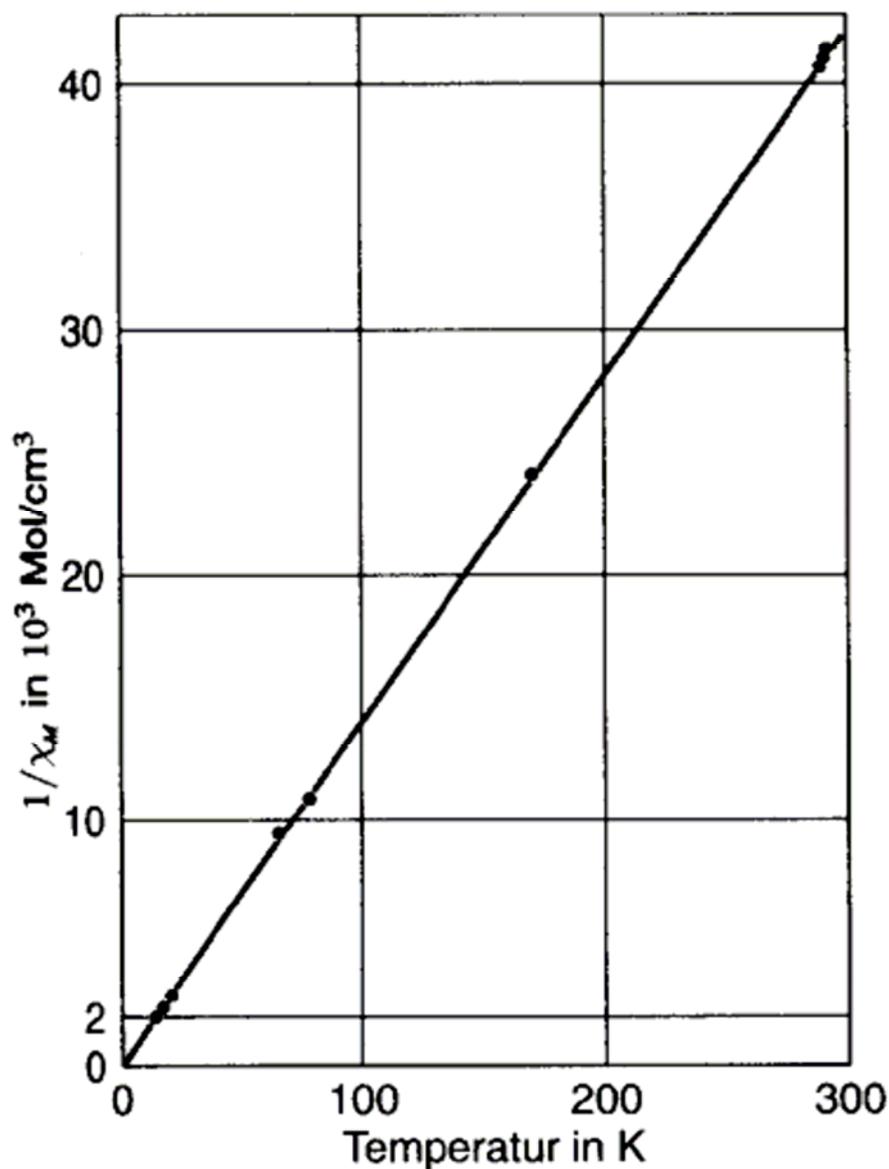
Bemerkungen : χ_{Pauli} und C_V hängen nach (6.28) und (6.22) nur von $D(E_F)$ ab;
dies gilt auch wenn man die Wechselwirkung mit den Ionenrümpfen
miteinbezieht.

- verschiedene Wechselwirkungen können χ_{Pauli} und C_V erhöhen
z.B. die Korrelationen
- man muss auch einen geringen diamagnetischen Teil in χ_{Elektron} berücksichtigen

VI.5.2 Experimentelle Suszeptibilitäten

- einfache Metalle haben in der Regel weitgehend temperaturunabhängige
Suszeptibilitäten
einfach bedeutet hier : keine unaufgefüllte Schale
- in d-Metallen ist die Suszeptibilität komplizierter, da schon die elektronischen
Bestandteile nicht $E \sim k^2$ entspricht, und starke Korrelationen existieren
(Übergang zu lokalisierten Elektronen)

Wiederholung: atomarer Paramagnetismus



Curie-Gesetz:

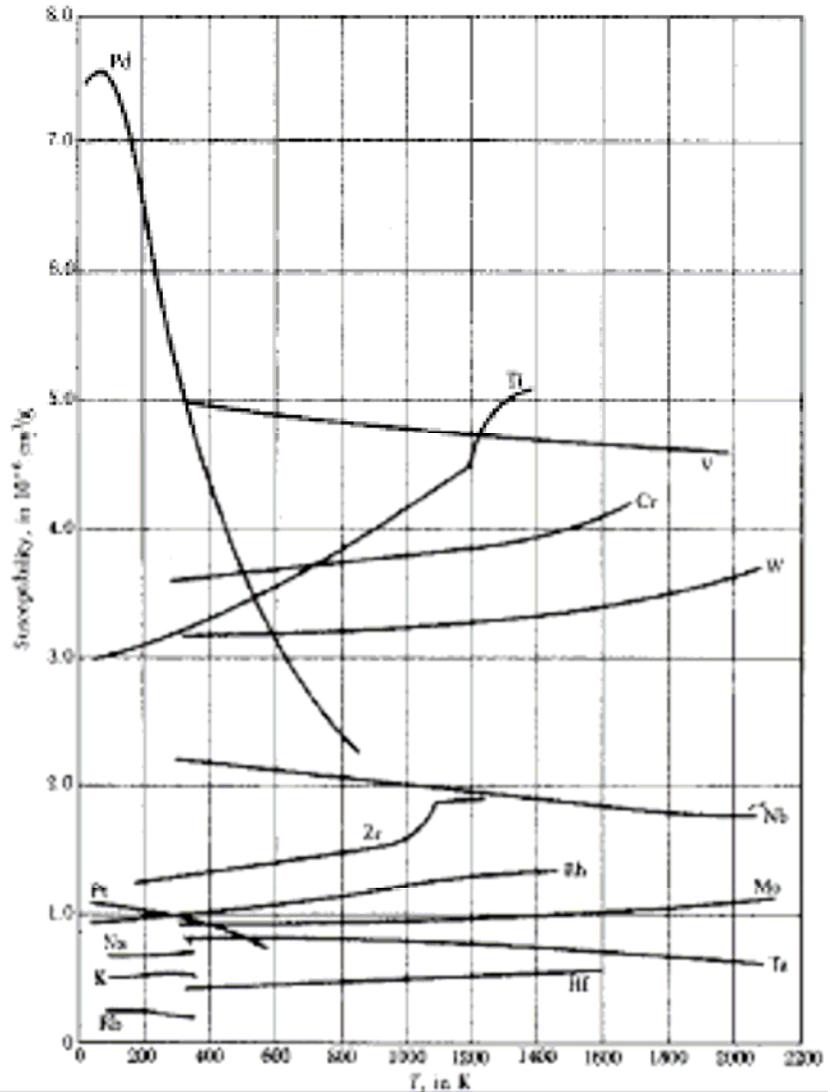
$$\chi = \frac{C}{T}$$

mit $C = \frac{N g^2 (J(J+1)) \mu_B^2}{3k_B}$

(effektive Zahl von
Bohrmagnetonen)²

Berechnung J , L , S :
Hundsche Regeln

Experimentelle Suszeptibilitäten



Paramagnetische Metalle:
Pd, Ti, V, Cr, W, Nb, Zr, Rh, Mo,
Ta, Hf, Na, Pt, K, Rb

VI.6 Transporteigenschaften in kinetischer Theorie

Prinzip : klassische Dynamik von Ladungsträgern
plus Pauli-Prinzip plus Fermi-Statistik

VI.6.1 Näherungen

Relaxationszeit : Elektronen kommen durch Stöße ins Gleichgewicht

Anmerkung : ohne die Relaxationsannahme würde der Strom unendlich anwachsen

-die Stöße sind wie folgt charakterisiert :

- (1) Stöße verändern die Geschwindigkeit der Elektronen abrupt ohne Korrelation zwischen Geschwindigkeit vor und nach dem Stoß
- (2) die Stoßwahrscheinlichkeit hängt nur von der Temperatur am Stoßort ab
- (3) zwischen den Stößen bewegen sich die Elektronen ungestört

VI.6.2 Bewegungsgleichungen

$$m \, d\mathbf{v}/dt = \mathbf{F} + \mathbf{F}_{\text{Stoß}} \quad \mathbf{v} \text{ Teilchengeschwindigkeit} \quad \mathbf{F} \text{ Kraft (z.B. } e\mathbf{E})$$

wir interessieren uns für den Mittelwert

$$m \, d\mathbf{v}_D/dt = \langle \mathbf{F} \rangle_t + \langle \mathbf{F}_{\text{Stoß}} \rangle_t \quad (6.30) \quad \text{mit } \mathbf{v}_D \text{ Driftgeschwindigkeit}$$

-Ansatz : $\langle \mathbf{F}_{\text{Sto\ss}} \rangle_t = -m \cdot \mathbf{v}_D / \tau$

((Bedeutung : Sto\ss f\uhrt im Mittel dazu, dass Teilchen von \mathbf{v}_D innerhalb τ auf $\mathbf{0}$ abgebremst wird.))

freie Wegl\ange : $l = v \cdot \tau$

Bewegungsgleichung :

$$m \cdot (d\mathbf{v}_D/dt + \mathbf{v}_D/\tau) = \mathbf{F} \quad (6.31)$$

Spezialf\alle : (I) $F=0$: $\rightarrow d\mathbf{v}_D/dt = -\mathbf{v}_D/\tau \rightarrow \mathbf{v}_D(t) = \mathbf{v}_D(0) \exp[-(t/\tau)]$

Falls $\mathbf{v}_D(0)$ ungleich 0, relaxiert das Teilchengas mit der charakteristischen Zeit τ

(II) Sto\ssfreies Gas : $F_{\text{Sto\ss}}=0$ dann ist $m(d\mathbf{v}_D/dt) = \mathbf{F}$
somit w\achst die Driftgeschwindigkeit kontinuierlich

ABER : Ohm'sches Gesetz $\mathbf{j} = \sigma \cdot \mathbf{E}$

\mathbf{j} ist station\ar !

-Mit der einfachen kinetischen Theorie lassen sich viele Phänomene diskutieren und näherungsweise erklären :
 Widerstand
 Wärmeleitfähigkeit
 Thermokraft
 Hall-Effekt

VI.7 Elektrischer Widerstand

$$\text{Ohm'sches Gesetz } \mathbf{j} = \sigma \cdot \mathbf{E} = \rho^{-1} \cdot \mathbf{E}$$

\mathbf{j} Stromdichte

\mathbf{E} elektrisches Feld

σ spezifische Leitfähigkeit

ρ spezifischer Widerstand

Achtung : σ und ρ sind Tensoren zweiter Stufe (im folgenden unterdrückt!)

VI.7.1 Drude Formel

Wir betrachten die Bewegungsgleichungen (6.30) und (6.31)

mit $\mathbf{F} = -e\mathbf{E}$ und suchen eine stationäre Lösung : $\mathbf{j} = -n \cdot e \cdot \mathbf{v}_D$

$$(6.31) \rightarrow m \cdot (\mathbf{v}_D / \tau) = -e\mathbf{E} \rightarrow \mathbf{j} = -ne \mathbf{v}_D = ne^2 / m \cdot \tau \cdot \mathbf{E}$$

Vergleich mit dem Ohm'schen Gesetz : $\sigma = ne^2 \cdot \tau / m$ (6.32) Drude Formel

-mit der mittleren freien Weglänge $l=v \cdot \tau$ ergibt sich :

$$\sigma = ne^2 / m \cdot l/v = (ne^2 / P) \cdot l$$

Achtung hier ist v , P Geschwindigkeit und Impuls der am Stoß beteiligten Teilchen und nicht die Driftgeschwindigkeit !

Drude entwickelte diese Theorie mit der klassischen Physik ($1/2 \cdot m \cdot v^2=3/2 \cdot kT$)

Die Quantenmechanik reduziert die möglichen Stöße erheblich, da nur Elektronen in der Nähe der Fermi-Energie stoßen können, damit ist $v \sim v_F$

und

$$l = v_F \tau$$

VI.7.2 Absolutgröße des Widerstandes

- Widerstand von Metallen bei Raumtemperatur in der Größenordnung $\mu\Omega\text{cm}$
- mit der Drude-Formel kann man damit die freie Weglänge ermitteln :

$$\rho(300\text{K}) \sim 1 \mu\Omega\text{cm}$$

$$v_F \sim 10^8 \text{cm/sec} \rightarrow l(300\text{K}) \sim 30\text{nm}$$

- bei fallender Temperatur nimmt ρ ab und l zu
es gilt : $l \gg a$ (Gitterkonstante)

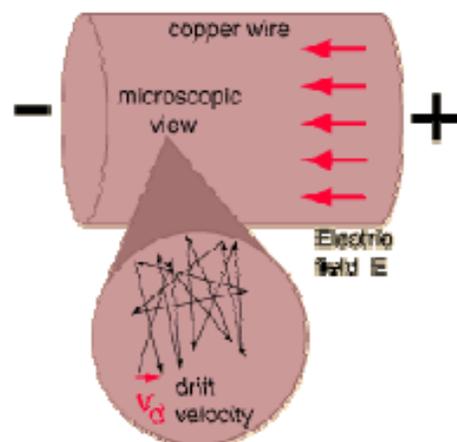
Folgerung : Die Elektronen streuen nicht an den Atompositionen !

Die Streuung erfolgt an den Störstellen des Gitters und an Phononen!

Drude-Relaxationszeiten in Einheiten von 10^{-14} s

Element	77 K	273 K	373 K
Li	7,3	0,88	0,61
Na	17	3,2	
K	18	4,1	
Rb	14	2,8	
Cs	8,6	2,1	
Cu	21	2,7	1,9
Ag	20	4,0	2,8
Au	12	3,0	2,1
Be		0,51	0,27
Mg	6,7	1,1	0,74
Ca		2,2	1,5
Sr	1,4	0,44	
Ba	0,66	0,19	
Nb	2,1	0,42	0,33
Fe	3,2	0,24	0,14
Zn	2,4	0,49	0,34
Cd	2,4	0,56	
Hg	0,71		
Al	6,5	0,80	0,55
Ga	0,84	0,17	
In	1,7	0,38	0,25
Tl	0,91	0,22	0,15
Sn	1,1	0,23	0,15
Pb	0,57	0,14	0,099
Bi	0,072	0,023	0,016
Sb	0,27	0,055	0,036

Paul Drude
(1863-1906)

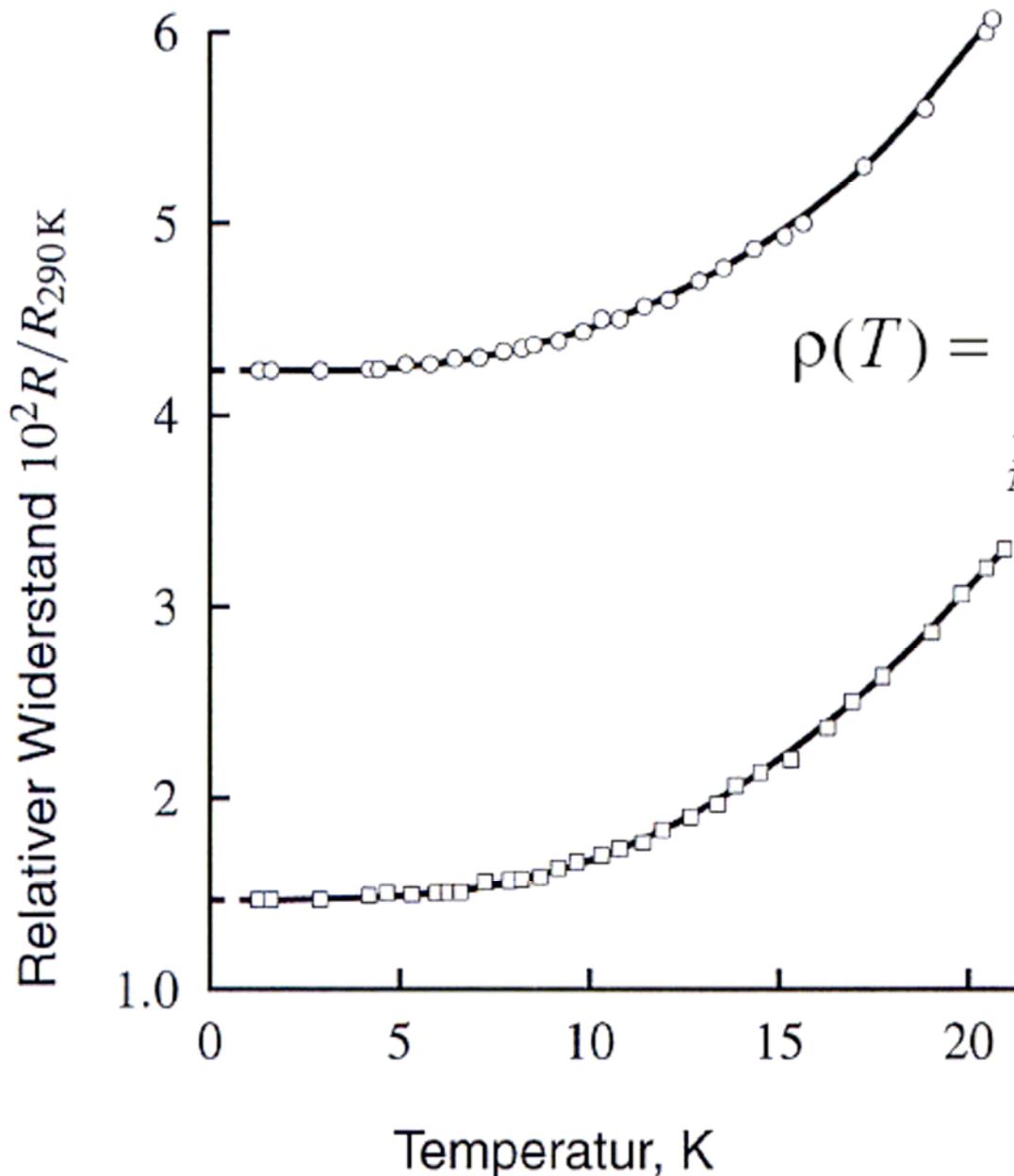


Klassische Drude-Theorie (1900):
Elektronen "driften" durch Metalle

$$\Rightarrow \vec{v}_d = -\frac{e}{m} \vec{E} \cdot \tau$$

$$\vec{j} = nq\vec{v} = \underbrace{ne^2\tau}_{\sigma} \vec{E} \Rightarrow \rho = \frac{m}{ne^2\tau}$$

Widerstand von Kalium unterhalb von 20 K für zwei verschiedene Proben.



$$\rho(T) = \underbrace{\rho_{\text{Ph}}(T)}_{\lim_{T \rightarrow 0} \rho_{\text{Ph}}(T) = 0} + \underbrace{\rho_i(T)}_{\lim_{T \rightarrow 0} \rho_i(T) = \rho_i(0)}$$

Widerstandsverhältnis:

$$\frac{\rho(T = 293 \text{ K})}{\rho(T = 0 \text{ K})} = 1.1 \dots 1000$$

Ein Fremdatom verursacht einen Restwiderstand von $1 \cdot 10^{-6} \Omega \text{cm}$ pro Atomprozent der Verunreinigung.

Widerstand von Metallen

Element	77 K	273 K	373 K	$\frac{(\rho/T)_{373\text{ K}}}{(\rho/T)_{273\text{ K}}}$
Li	1,04	8,55	12,4	1,06
Na	0,8	4,2	flüssig	
K	1,38	6,1	flüssig	
Rb	2,2	11,0	flüssig	
Cs	4,5	18,8	flüssig	
Cu	0,2	1,56	2,24	1,05
Ag	0,3	1,51	2,13	1,03
Au	0,5	2,04	2,84	1,02
Be		2,8	5,3	1,39
Mg	0,62	3,9	5,6	1,05
Ca		3,43	5,0	1,07
Sr	7	23		
Ba	17	60		
Nb	3,0	15,2	19,2	0,92
Fe	0,66	8,9	14,7	1,21
Zn	1,1	5,5	7,8	1,04
Cd	1,6	6,8		
Hg	5,8	flüssig	flüssig	
Al	0,3	2,45	3,55	1,06
Ga	2,75	13,6	flüssig	
In	1,8	8,0	12,1	1,11
Tl	3,7	15	22,8	1,11
Sn	2,1	10,6	15,8	1,09
Pb	4,7	19,0	27,0	1,04
Bi	35	107	156	1,07
Sb	8	39	59	1,11

* Die Werte in $\mu\Omega\text{cm}$ sind angegeben bei 77 K (dem Siedepunkt des flüssigen Stickstoffs bei Atmosphärendruck), 273 K und 373 K. In der letzten Spalte findet man das Verhältnis aus ρ/T bei 373 K und 273 K, zur Verdeutlichung des annähernd linearen Temperaturverlaufs des Widerstandes in der Nähe der Raumtemperatur. (Quelle: G. W. C. Kaye, T. H. Laby, *Table of Physical and Chemical Constants*, Longmans Green, London, 1966).

Bei hohen Temperaturen
gilt für die Zahl der

Phononen

$$\langle n \rangle \propto T$$

Der elektrische

Widerstand eines

Metalls sollte dann

proportional zur

Temperatur T sein

$$\Rightarrow \rho_{\text{Ph}} \propto T$$

Temperaturverlauf des elektrischen Widerstandes

(1) Sehr tiefe Temperaturen

$$\rho_{\text{Ph}} \propto T^5 / \theta_D^6 \quad (\text{Bloch})$$

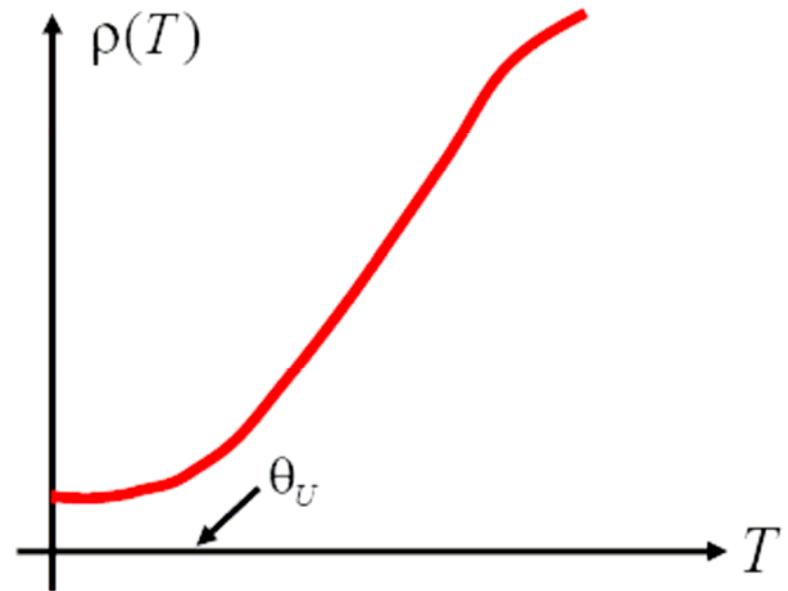
keine Umklapp-Prozesse für
 $T < 2 \text{ K}$ möglich im Fall von
Kalium ($q_0 = 0.267 k_F$)

(2) Tiefe Temperaturen (Umklapp-
Prozesse möglich)

$$\langle n \rangle \propto e^{-\theta_U/T}, \quad \theta_U - \text{charakteristische}$$

Umklapp-Temperatur

Kalium: $\theta_U = 23 \text{ K}$, $\theta_D = 91 \text{ K}$

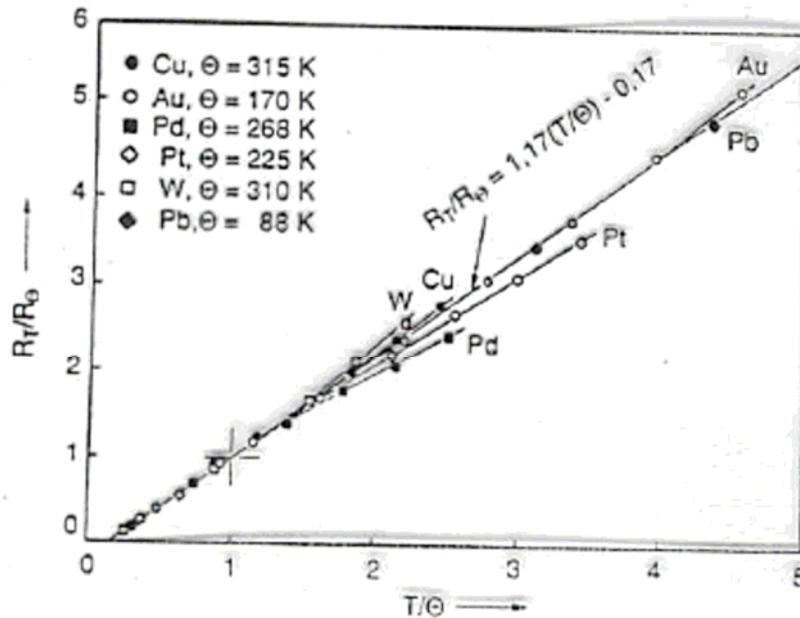


(3) Hohe Temperaturen

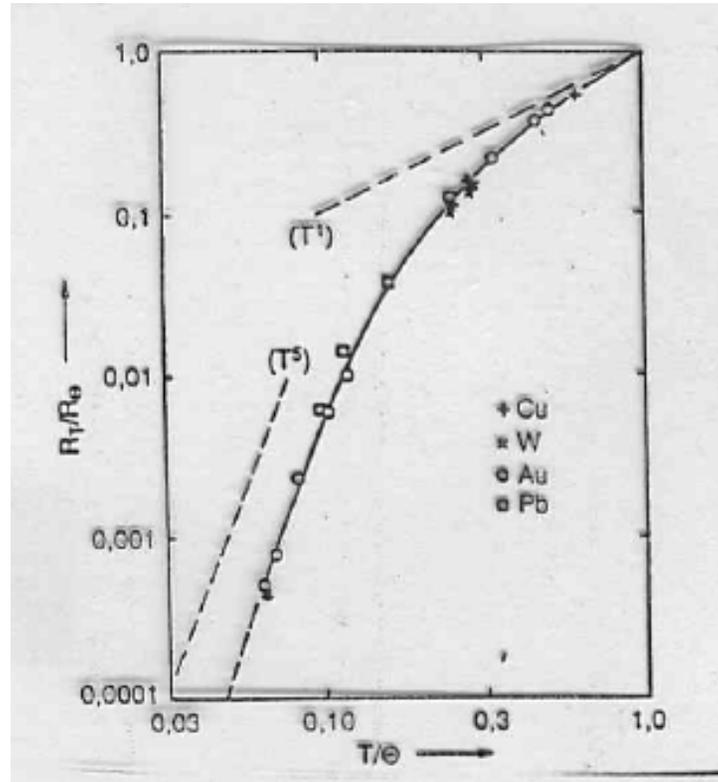
$$\langle n \rangle \propto T$$

$$\Rightarrow \rho_{\text{Ph}} \propto T$$

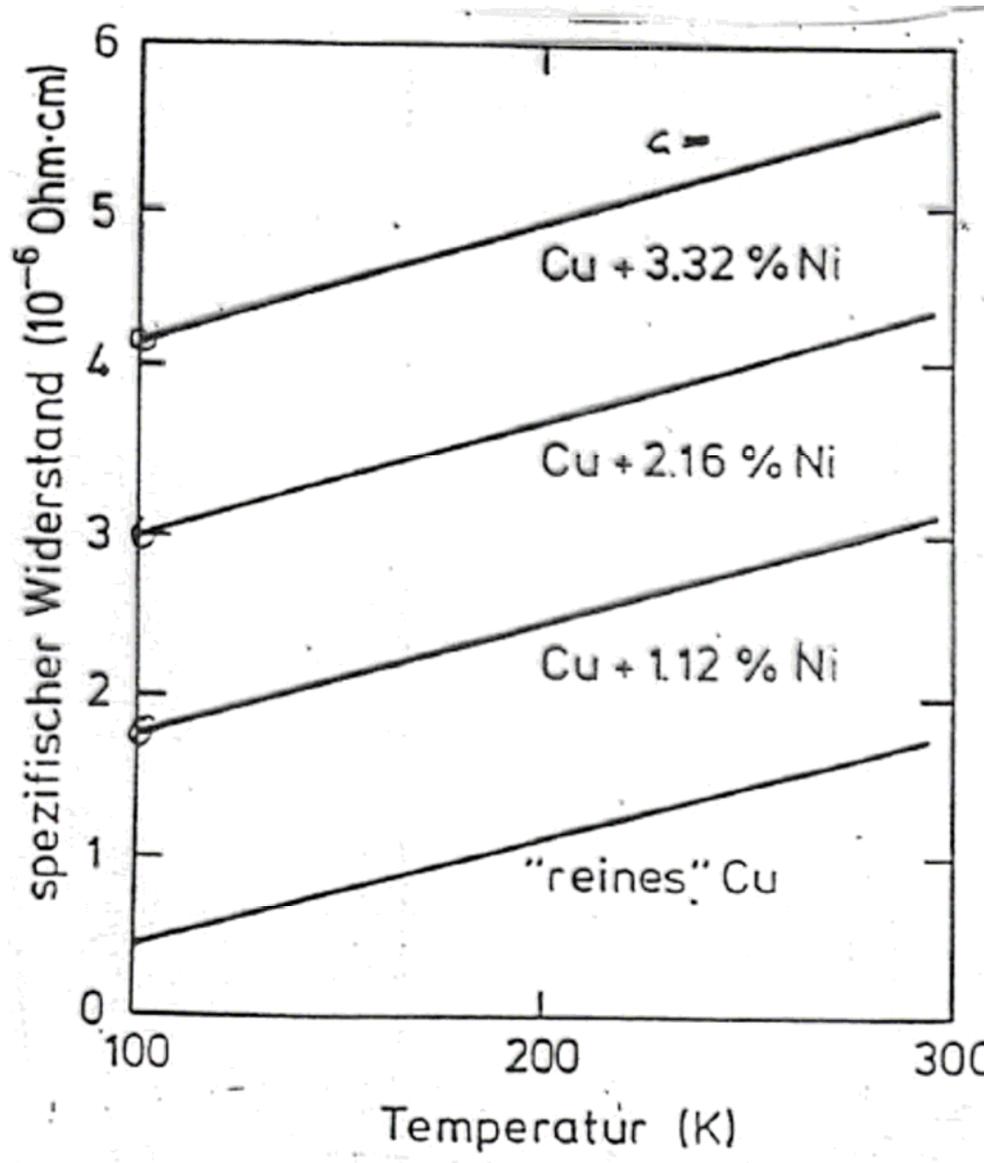
Widerstand skaliert grob mit der Debye-Temperatur !



Übergang von T^5 nach T !



Matthiessen-Regel : Legierung \rightarrow Verschiebung von $\rho(T)$



VI.8 Thermische Leitfähigkeit

$$\lambda_{\text{Phononen}}(T) = \frac{1}{3} C_{\text{Gitter}}(T) v_{\text{Schall}}(T) l_{\text{Phononen}}(T)$$

Dies kann man sinngemäß für Elektronen übernehmen:

$$\lambda_{\text{Elektronen}}(T) = \frac{1}{3} C_{\text{Elektronen}}(T) v_{\text{Fermi}}(T) l_{\text{Streuung}}(T)$$

Mit $C_{\text{Elektronen}}(T) = \frac{\pi^2 n k_B^2}{2 E_F} \cdot T$ (Wärmekapazität pro Volumen)

$$E_F = \frac{1}{2} m v_F^2, \quad v_{\text{Fermi}}(T) \approx v_F, \quad l_{\text{Streuung}}(T) \approx v_F \tau$$

$$\Rightarrow \lambda_{\text{Elektronen}}(T) = \frac{1}{3} \frac{\pi^2 n k_B^2}{m v_F^2} \cdot T \cdot v_F \cdot v_F \tau = \frac{1}{3} \frac{\pi^2 n k_B^2}{m} T \tau \quad (6.33)$$

$$\frac{\text{Thermische Leitfähigkeit}}{\text{Elektrische Leitfähigkeit}} = \frac{\lambda_{\text{El}}}{\sigma} = \frac{\pi^2 n k_B^2 T \tau / (3m)}{n e^2 \tau / m} \quad (6.34)$$

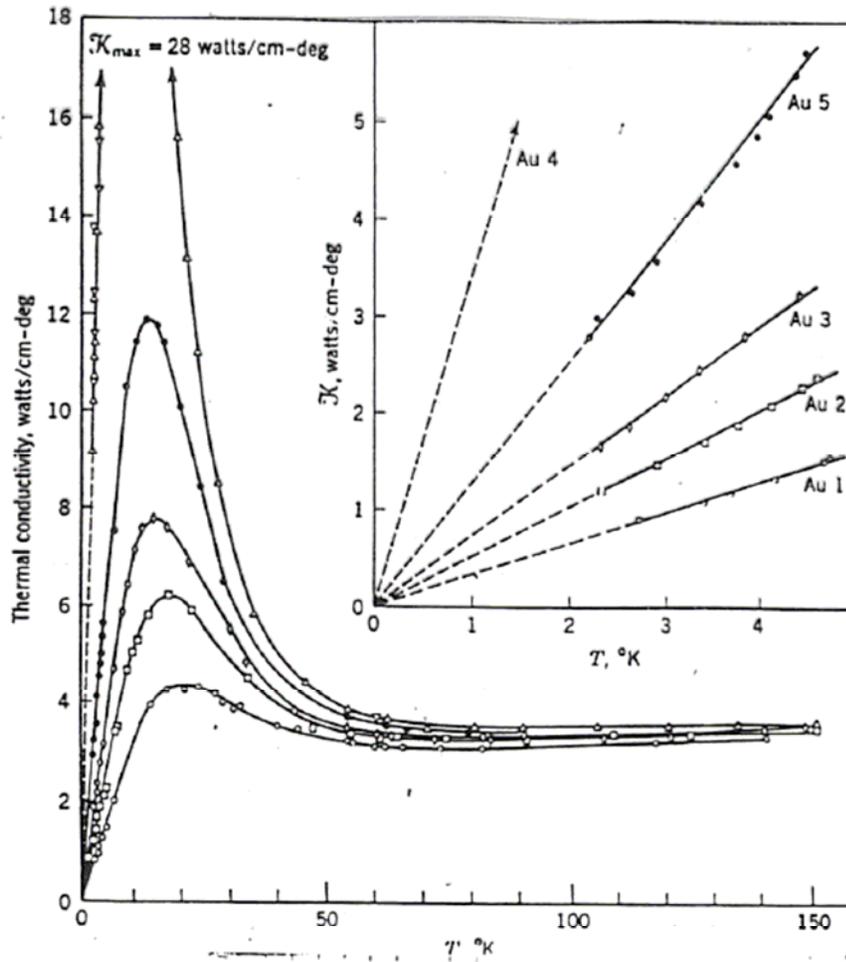
Wiedemann - Franz - Gesetz :

$$\frac{\lambda_{\text{El}}}{\sigma} = \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k_B}{e} \right)^2 \cdot T = L \cdot T \quad \text{mit} \quad L = \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k_B}{e} \right)^2 = 2.45 \cdot 10^{-8} \frac{\text{W}\Omega}{\text{K}^2} \quad (6.35)$$

Aus dem Modell des freien Elektronengases folgt, dass die Lorenz-Zahl L vom Material und von der Temperatur unabhängig ist!

Tabelle 6.5: Experimentelle Lorenz-Zahlen

$L \cdot 10^8 \text{ Watt } \Omega/\text{K}^2$			$L \cdot 10^8 \text{ Watt } \Omega/\text{K}^2$		
Metall	0° C	100° C	Metall	0° C	100° C
Ag	2,31	2,37	Pb	2,47	2,56
Au	2,35	2,40	Pt	2,51	2,60
Cd	2,42	2,43	Sn	2,52	2,49
Cu	2,23	2,33	W	3,04	3,20
Mo	2,61	2,79	Zn	2,31	2,33



-Wann gilt Wiedemann-Frantz-Gesetz nicht mehr?
 wenn thermische und elektronische Relaxationszeit nicht
 mehr gleich sind !

VI.9 Bewegung im Magnetfeld

VI.1 Zyklotronfrequenz

ein einzelnes Elektron im Magnetfeld $\mathbf{F}_L = -e(\mathbf{v} \times \mathbf{B})$

Lorentz-Kraft

$$\rightarrow m \, d\mathbf{v}/dt = -e(\mathbf{v} \times \mathbf{B})$$

Sei $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ $\mathbf{v} = (v_x, v_y, v_z)$

$$m \, dv_x/dt = -eBv_y$$

$$m \, dv_y/dt = eBv_x$$

$$m \, dv_z/dt = 0$$

$$\rightarrow v_x = v_0 \cos(\omega_c t)$$

$$v_y = v_0 \sin(\omega_c t)$$

$v_z = 0$ die Projektion auf die x,y-Ebene ist eine Kreisbahn, die mit der Zyklotronfrequenz ω_c durchlaufen wird.

$$\omega_c = B e/m \quad (6.36)$$

Größenordnung : $\omega_c \sim 1.7 \cdot 10^{11} B$ Einheit [sec⁻¹] für B in Tesla

- Im Festkörper bewegt sich das Elektron nur über kurze Zeit τ frei, daher ist zu unterscheiden :

a) $\omega_c \tau \gg 1$ **hohe Felder**

- Kreisbahn wird häufig durchlaufen, bevor es zu einem Stoß komme

→ ebene Wellen sind keine „guten“ Eigenzustände mehr

→ Hamilton-Operator muss das Magnetfeld von Anfang an miteinbeziehen!

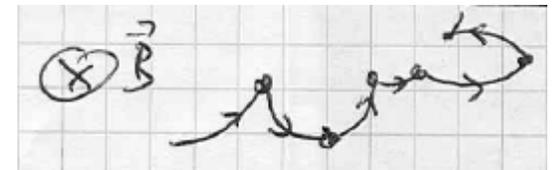
→ damit ergeben sich andere Eigenzustände =: Landau-Level
aber τ ist temperaturabhängig

→ temperaturabhängiger Übergang in reinen Metallen
bei genügend tiefen Temperaturen gilt : $\omega_c \tau \gg 1$

b) $\omega_c \tau \ll 1$ **niedrige Felder**

ursprüngliche Eigenzustände bleiben verwendbar

Bewegungsgleichung \Leftrightarrow Lorentz-Kraft



Typische Werte $l(300K) \sim 100\text{nm}$

$v_F \sim 10^8 \text{ m/sec}$

$\tau \sim l/v_F \sim 10^{-13} \text{ sec}$

$\omega_c(B=1T) \sim 10^{11} \text{ sec}^{-1}$

$$\omega_c \tau = 0.01$$

Aber bei Kühlen erreicht man leicht $\omega_c \tau \gg 1$!

VI.9.3 Hall-Effekt

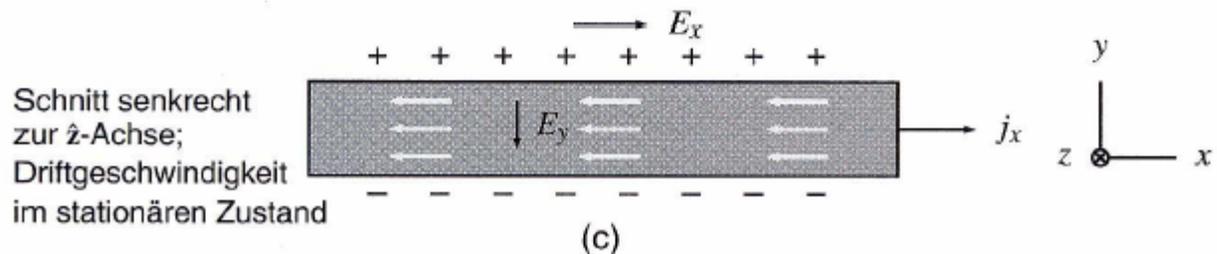
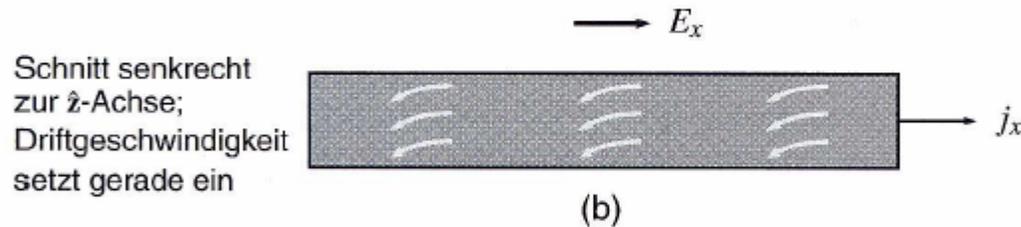
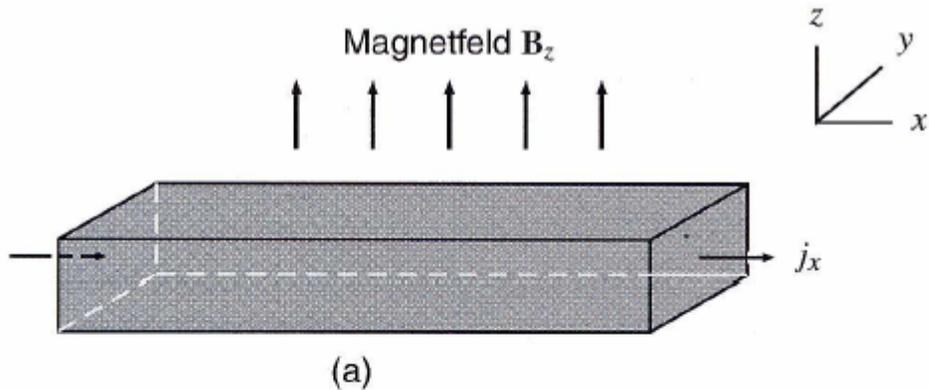
$\mathbf{F}_L = -e(\mathbf{v} \times \mathbf{B})$ Lorentz-Kraft bewirkt eine Ablenkung :

Anhäufung von Ladungen \rightarrow elektrisches Feld E_H

$$-e E_H = -\mathbf{F}_L = e(\mathbf{v} \times \mathbf{B})$$



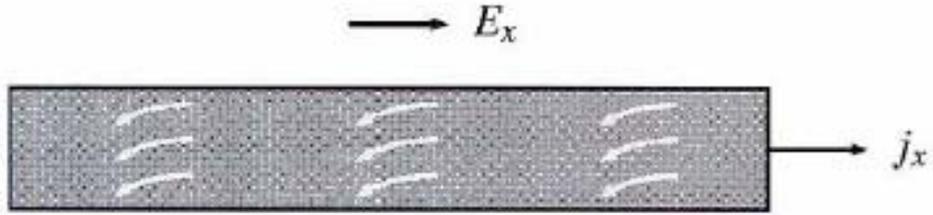
Edwin Herbert
Hall (1855-1938)
Entdeckung des
Hall-Effektes 1879



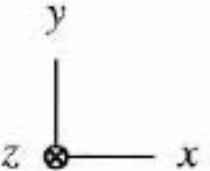
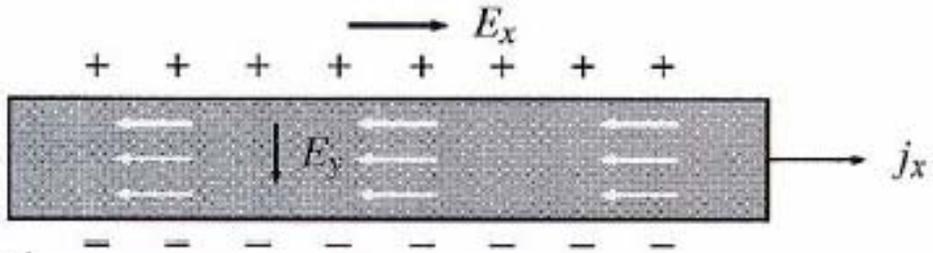


Edwin Herbert Hall (1855-1938)

Schnitt senkrecht zur \hat{z} -Achse;
Driftgeschwindigkeit setzt gerade ein



Schnitt senkrecht zur \hat{z} -Achse;
Driftgeschwindigkeit im stationären Zustand



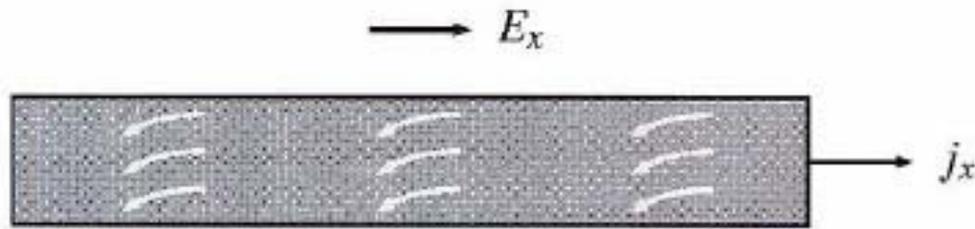
$$v_x = -\frac{e\tau}{m}E_x - \omega_c \tau v_y, \quad v_y = -\frac{e\tau}{m}E_y + \omega_c \tau v_x, \quad v_z = -\frac{e\tau}{m}E_z$$

Die Elektronen fließen in y -Richtung nicht aus dem Stab $\Rightarrow v_y = 0$

$$v_y = -\frac{e\tau}{m}E_y + \omega_c \tau v_x = 0 \Rightarrow E_y = \frac{m\omega_c}{e}v_x = -\omega_c \tau E_x$$

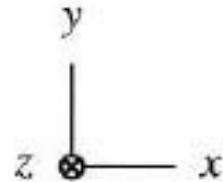
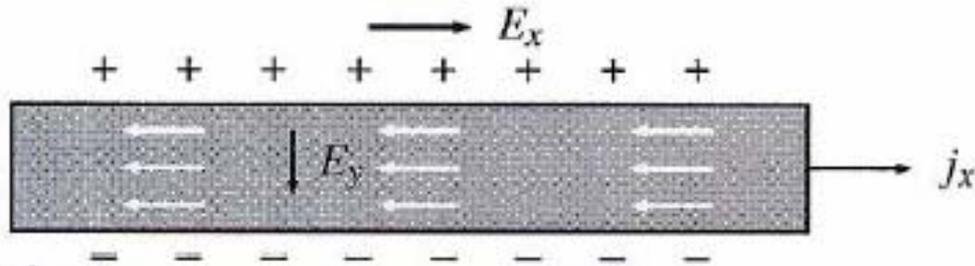
$$\Rightarrow E_y = -\frac{eB\tau}{m}E_x \quad j_x = \sigma E_x = \frac{ne^2\tau}{m} \cdot E_x$$

Schnitt senkrecht zur \hat{z} -Achse;
Driftgeschwindigkeit setzt gerade ein



Edwin Herbert Hall (1855-1938)

Schnitt senkrecht zur \hat{z} -Achse;
Driftgeschwindigkeit im stationären Zustand



$$\Rightarrow E_y = -\frac{eB\tau}{m} E_x \quad j_x = \sigma E_x = \frac{ne^2\tau}{m} \cdot E_x \quad (6.37)$$

Als Hall-Konstante definiert man:

$$R_H = \frac{E_y}{j_x B} = -\frac{eB\tau E_x / m}{ne^2\tau E_x B / m} = -\frac{1}{ne} \quad (6.38)$$

Der Hall-Widerstand ist definiert als: $\rho_H = BR_H = \frac{E_y}{j_x} = \frac{U_y}{I_x} \cdot d$

Gemessene und berechnete Hall-Konstanten (1)

Metall	Methode	Experimenteller Wert von R_H in 10^{-24} CGS-Einheiten	Angenommene Ladungsträger pro Atom	Berechnete Werte $-1/nec$ in 10^{-24} CGS-Einheiten
Li	konv.	-1,89	1 Elektron	-1,48
Na	Helikon	-2,619	1 Elektron	-2,603
K	konv.	-2,3	1 Elektron	-4,944
	Helikon	-4,946		
Rb	konv.	-4,7	1 Elektron	-6,04
	Helikon	-5,6		
Cu	konv.	-0,6	1 Elektron	-0,82
Ag	konv.	-1,0	1 Elektron	-1,19
Au	konv.	-0,8	1 Elektron	-1,18
Be	konv.	+2,7	-	-
Mg	konv.	0,92	-	-
Al	Helikon	?? +1,136	1 Loch	+1,135
In	Helikon	?? +1,774	1 Loch	+1,780
As	konv.	?? +50.	-	-
Sb	konv.	22.	-	-
Bi	konv.	-6000.	-	-

Hall-Koeffizienten ausgewählter Elemente in mittleren und starken Feldern*

Metall	Wertigkeit	$-1/R_H ec$
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

* Die Werte entsprechen annähernd den Grenzwerten von R_H in sehr starken Feldern (der Größenordnung 10^4 G) und bei sehr niedrigen Temperaturen in sorgfältig präparierten Proben. Die Angaben sind von der Form n_0/n , mit n_0 als derjenigen Ladungsträgerkonzentration, bei der das Drude-Ergebnis (1.21) mit dem gemessenen Wert R_H ($n_0 = -1/R_H ec$) konsistent ist. Offensichtlich verhalten sich die Alkalimetalle recht genau entsprechend der Drude-Theorie, während die Edelmetalle (Cu, Ag, Au) bereits davon abweichen; das Verhalten der restlichen Metalle in der Tabelle ist mit dem Drude-Modell nicht vereinbar.

Gemessene & berechnete

Hall-Konstanten (2)

$$\begin{aligned} \frac{R_H(\text{gemessen})}{R_H(\text{Theorie})} &= \\ &= \frac{-1/ne}{-1/n_0e} = \frac{n_0}{n} \end{aligned}$$

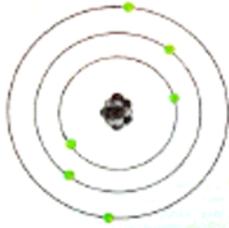
Messung der Hall-Konstanten : a) Ladungsträgerdichte
b) Vorzeichen der Ladungsträger

-Anwendung : Hall-Sonde zur Messung des Magnetfeldes

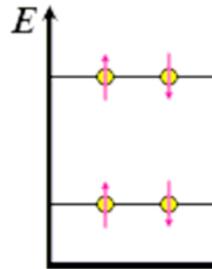
- Auswirkung auf den Magnetwiderstand : E_H kompensiert E_{lorenz}
→ Teilchen bewegen sich im Mittel geradlinig
→ es ergibt sich kein Magnetwiderstand

1 Atom \Rightarrow 2 Atome

Einzelatom

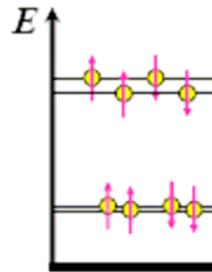
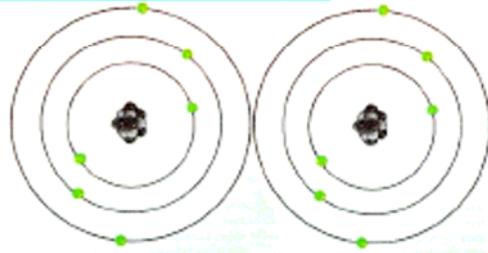


Quanten-
mechanik
 \Rightarrow PHYSIK IV



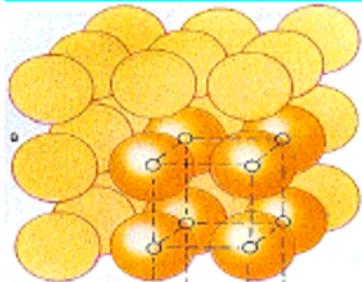
- ein Niveau

Zweiatomiges Molekül

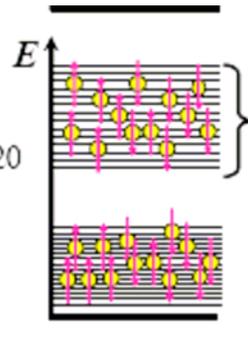


- zwei Niveaus

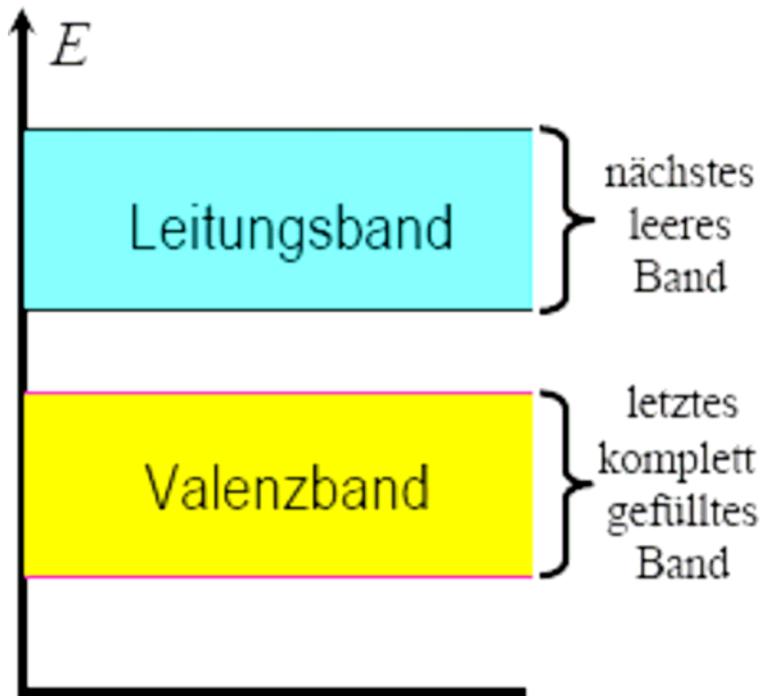
Viele Atome: Festkörper



$N > 10^{20}$



- viele Niveaus
 \rightarrow Bänder



VII. Energiebänder

VII.1 Vorbemerkungen

freies Elektronengas kann vieles erklären :

- thermische und elektrische Leitfähigkeit
- magnetische Suszeptibilität
- spezifische Wärme

- aber :
- a) Unzulänglichkeiten bei komplizierten Metallen
 - b) Auftreten von Halbleitern und Isolatoren
 - c) Beziehung von Leitungs- und Valenzelektronen
 - d) positive Hall-Konstante

Elektrischer Widerstand in einem guten Metall : $\rho \sim 10^{-10} \Omega\text{m}$

guter Isolator : $\rho \sim 10^{22} \Omega\text{m}$

der Unterschied mit einem Faktor 10^{32} ist sehr hoch !

-man muss von einer Vereinfachung des freien Elektronengases ablassen

HIER : Einbeziehung der Wechselwirkung mit den Ionenrümpfen

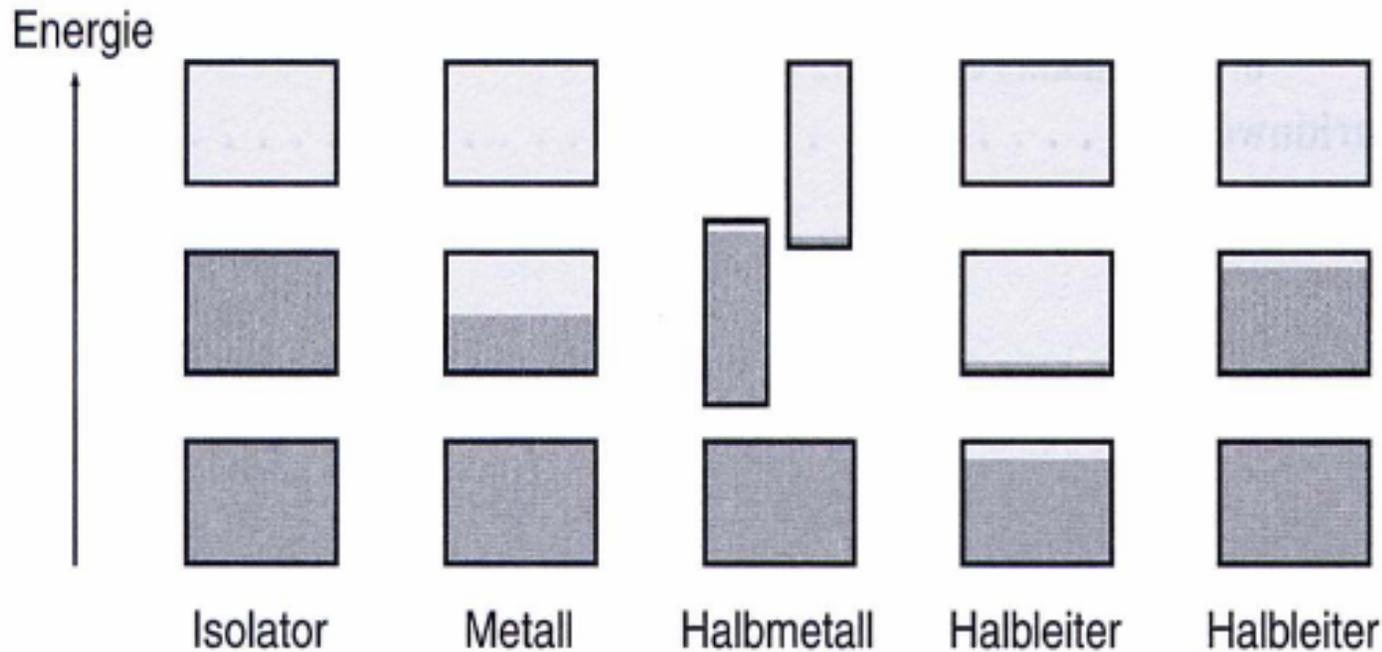
Freies Elektron : jeder Wert der Energie ist aufgrund von

$$E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \quad \text{erlaubt !}$$

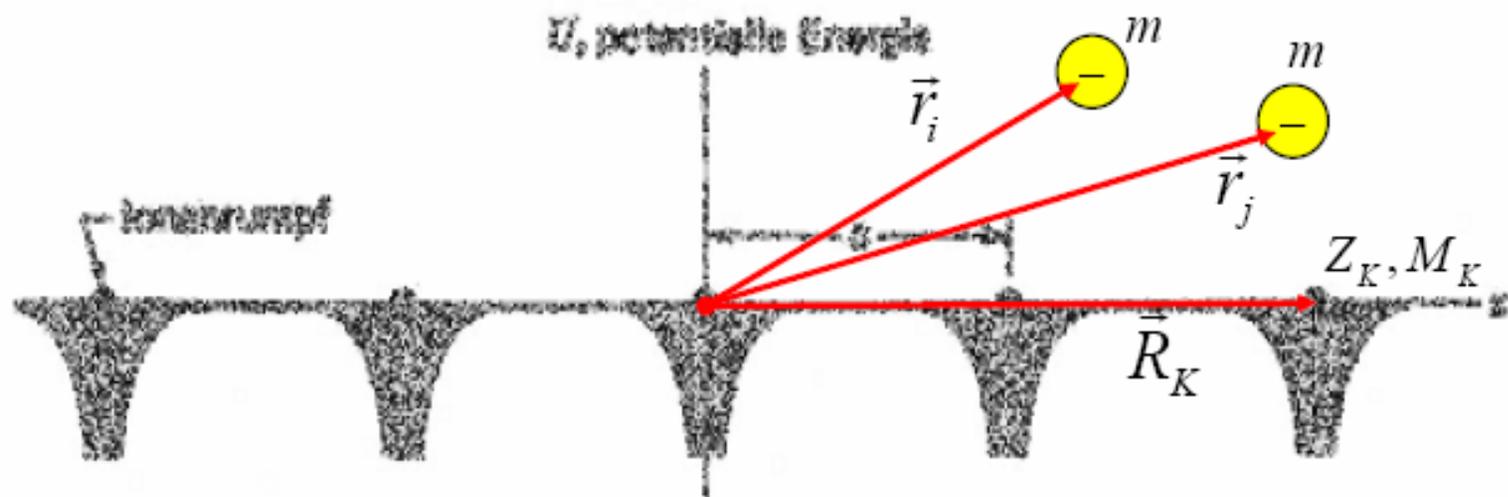
Einbeziehung des Gitterpotentials →

nur bestimmte Bereiche der Energie sind erlaubt =: Bänder

→ Begriff elektronische Bandstruktur

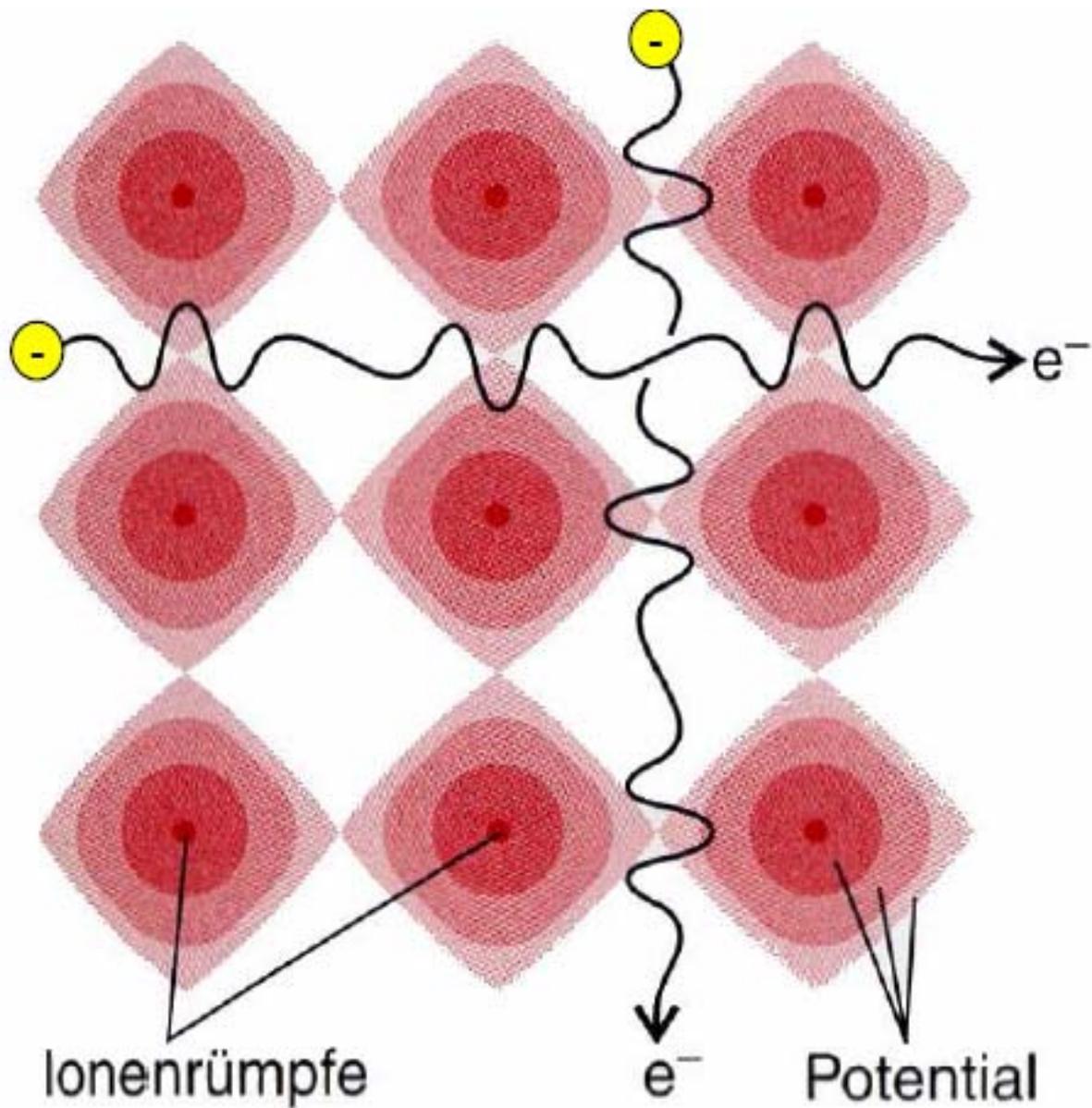


Wesentliches Element : Besteht eine Energie-Lücke oder nicht,
wenn ja, wie groß ist die im Vergleich zu kT ?



Hamilton-Operator eines Festkörpers (ohne Details wie Spin-Bahn Wechselwirkung etc.):

$$\hat{H} = \sum_i \frac{\vec{p}_i^2}{2m} - \sum_i \sum_K \frac{e^2 Z_K}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_i - \vec{R}_K|} + \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \\
 + \sum_K \frac{\vec{p}_K^2}{2M_K} + \frac{1}{2} \sum_K \sum_{L \neq K} \frac{e^2 Z_K Z_L}{4\pi\epsilon_0 |\vec{R}_K - \vec{R}_L|}$$



Elektronen bewegen
sich durch ein
periodisches Potenzial !

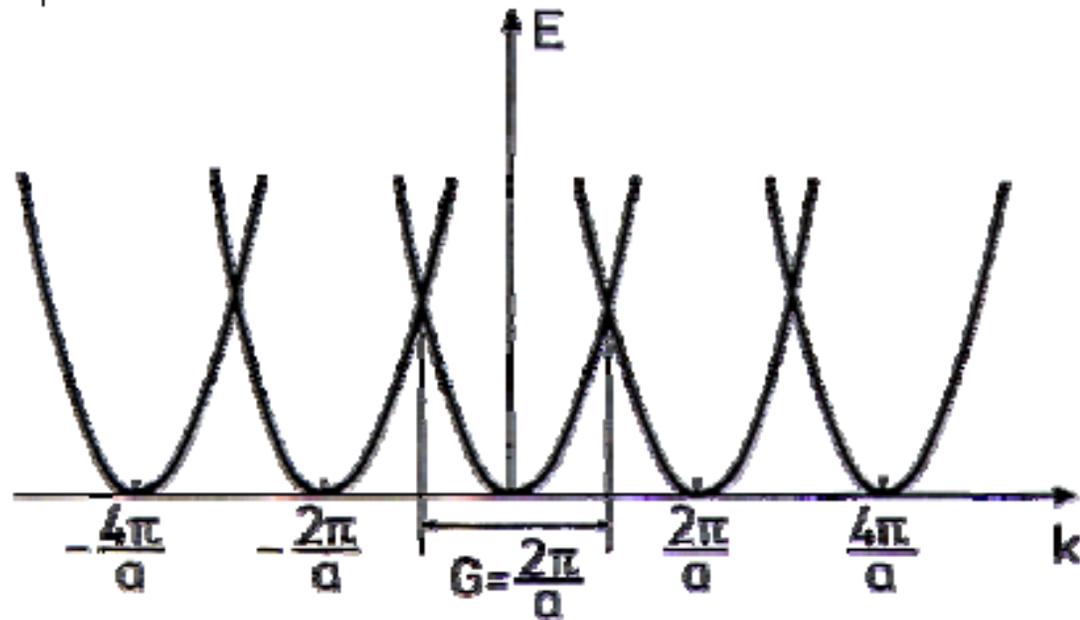
Modell des fast freien Elektrons

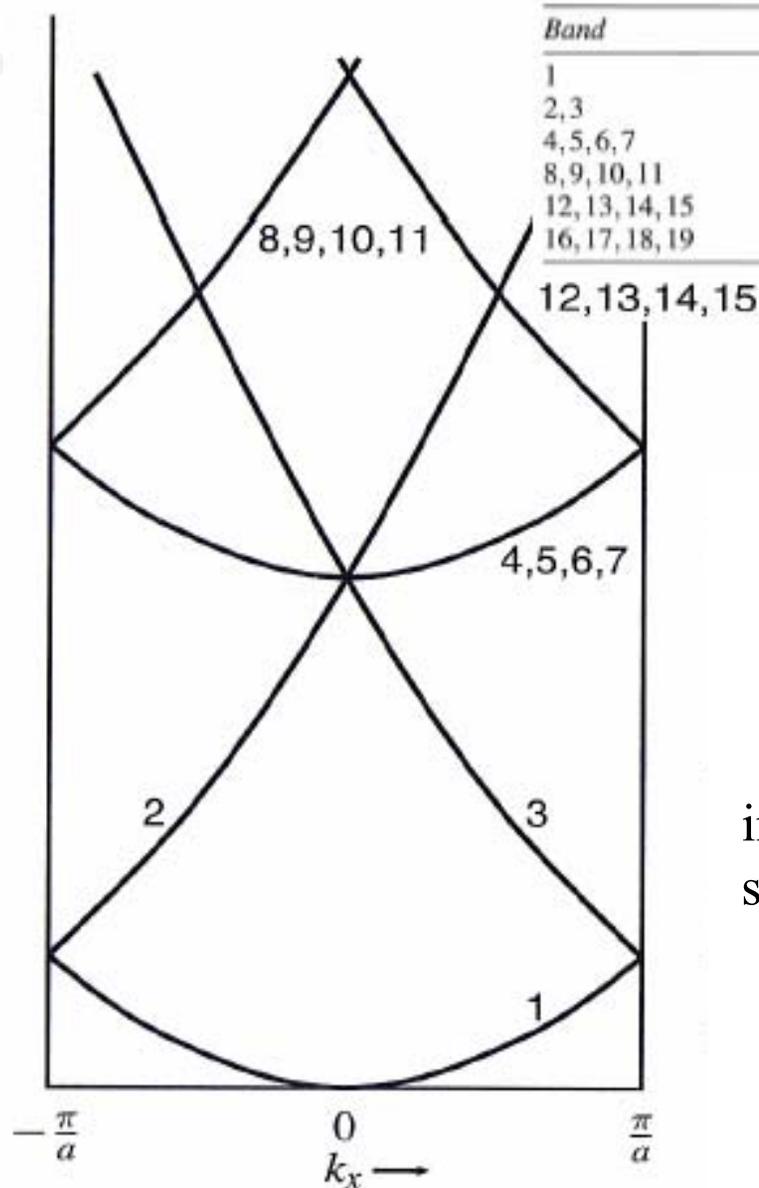
Das Potenzial ist periodisch. → die Dispersionsrelation des Elektrons muss Gitterperiodizität des reziproken Raum aufweisen!

$$E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \vec{k}^2 = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot |\vec{k} + \vec{G}|^2 \quad \text{mit einem reziproken Gittervektor } \vec{G}.$$

Für den 1D Fall

$$\text{ist: } G = n \cdot \frac{2\pi}{a}$$



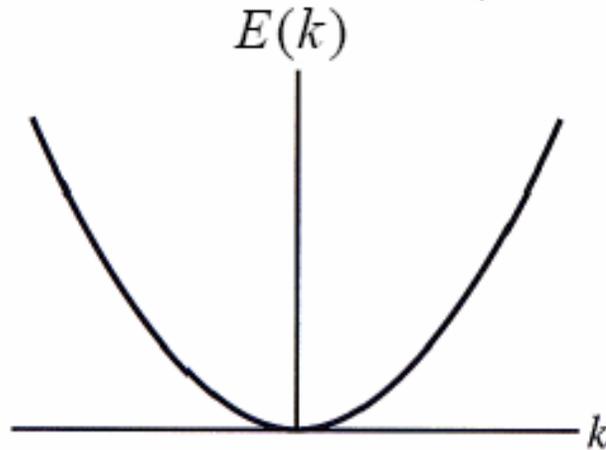


Band	$Ga/2\pi$	E (000)	$E(k_x, 00)$
1	000	0	k_x^2
2,3	100, $\bar{1}00$	$(2\pi/a)^2$	$(k_x \pm 2\pi/a)^2$
4,5,6,7	010, 0 $\bar{1}$ 0, 001, 00 $\bar{1}$	$(2\pi/a)^2$	$k_x^2 + (2\pi/a)^2$
8,9,10,11	110, 101, $\bar{1}\bar{1}$ 0, 10 $\bar{1}$	$2(2\pi/a)^2$	$(k_x + 2\pi/a)^2 + (2\pi/a)^2$
12,13,14,15	$\bar{1}\bar{1}$ 0, $\bar{1}$ 01, $\bar{1}\bar{1}$ 0, $\bar{1}$ 0 $\bar{1}$	$2(2\pi/a)^2$	$(k_x - 2\pi/a)^2 + (2\pi/a)^2$
16,17,18,19	011, 0 $\bar{1}$ 1, 01 $\bar{1}$, 0 $\bar{1}$ $\bar{1}$	$2(2\pi/a)^2$	$k_x^2 + 2(2\pi/a)^2$

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$$

in drei Dimensionen wird die Überlagerung sehr schnell sehr kompliziert !

Qualitatives Bild in 1 Dimension



Freies Elektronengas:

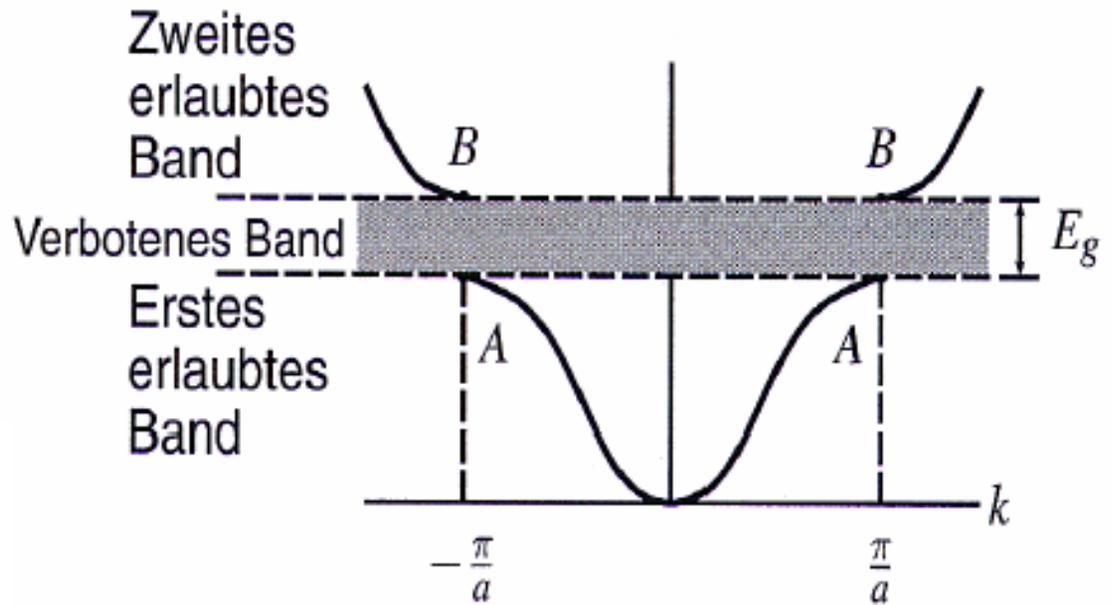
$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad k = 0, \pm \frac{2\pi}{L}, \pm \frac{4\pi}{L}, \dots$$

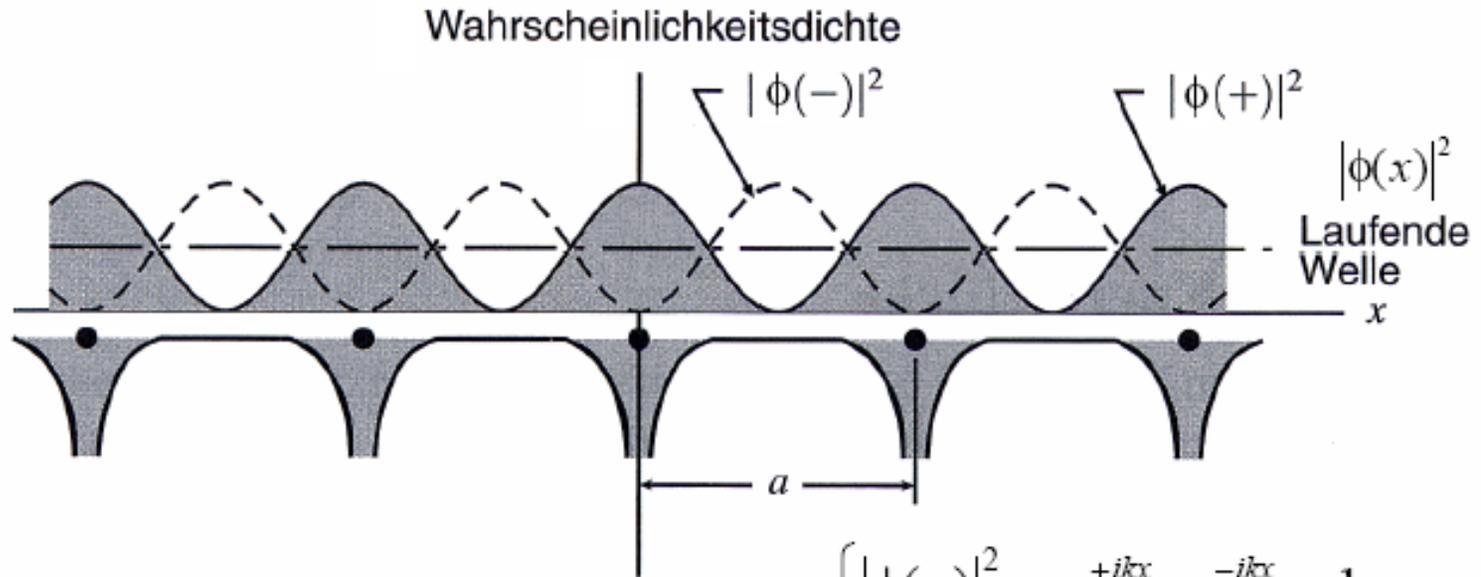
$$\phi_k(x) = \exp(ikx), \quad p = \hbar k$$

Bragg-Reflektion

→ Überlagerung der
beiden Wellen mit

$$k = \pm \frac{1}{2} G = \pm \frac{n\pi}{a}$$

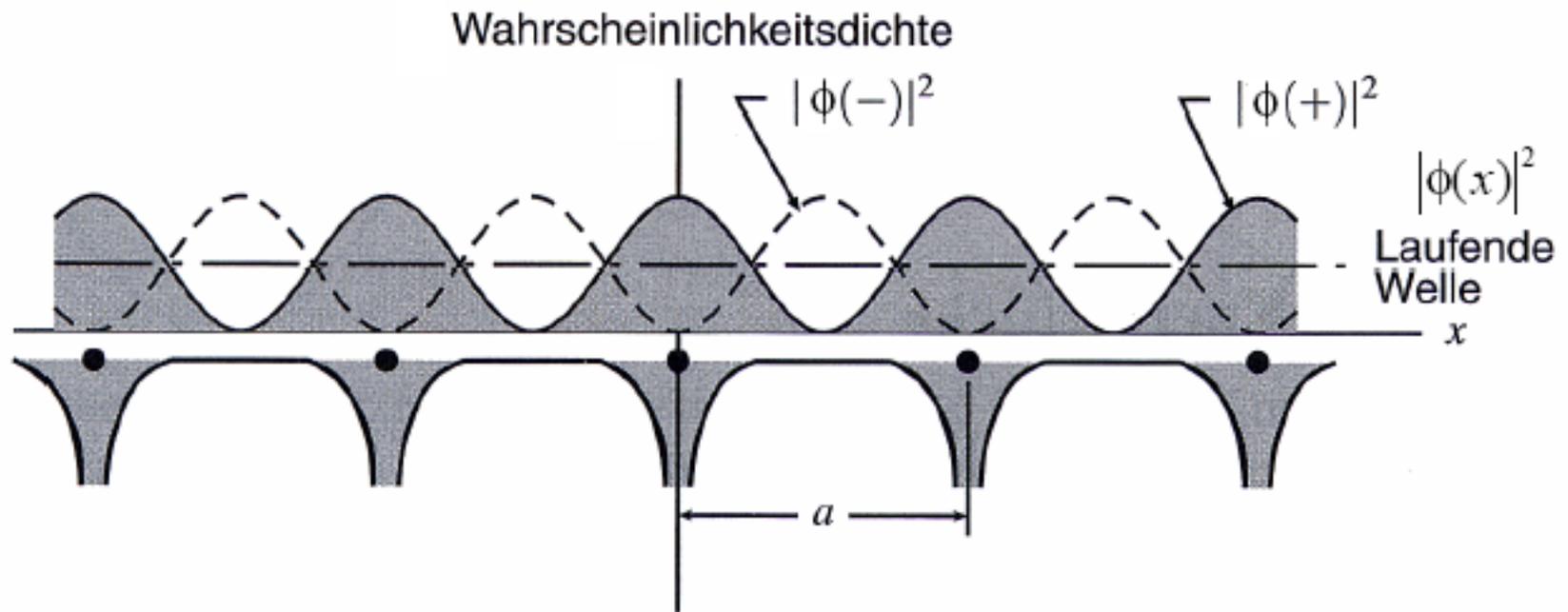




Aufenthaltswahrscheinlichkeiten:

$$\begin{cases} |\phi(x)|^2 = e^{+ikx} \cdot e^{-ikx} = 1 \\ |\phi(+)|^2 = 4 \cos^2(\pi x/a) \\ |\phi(-)|^2 = 4 \sin^2(\pi x/a) \end{cases}$$

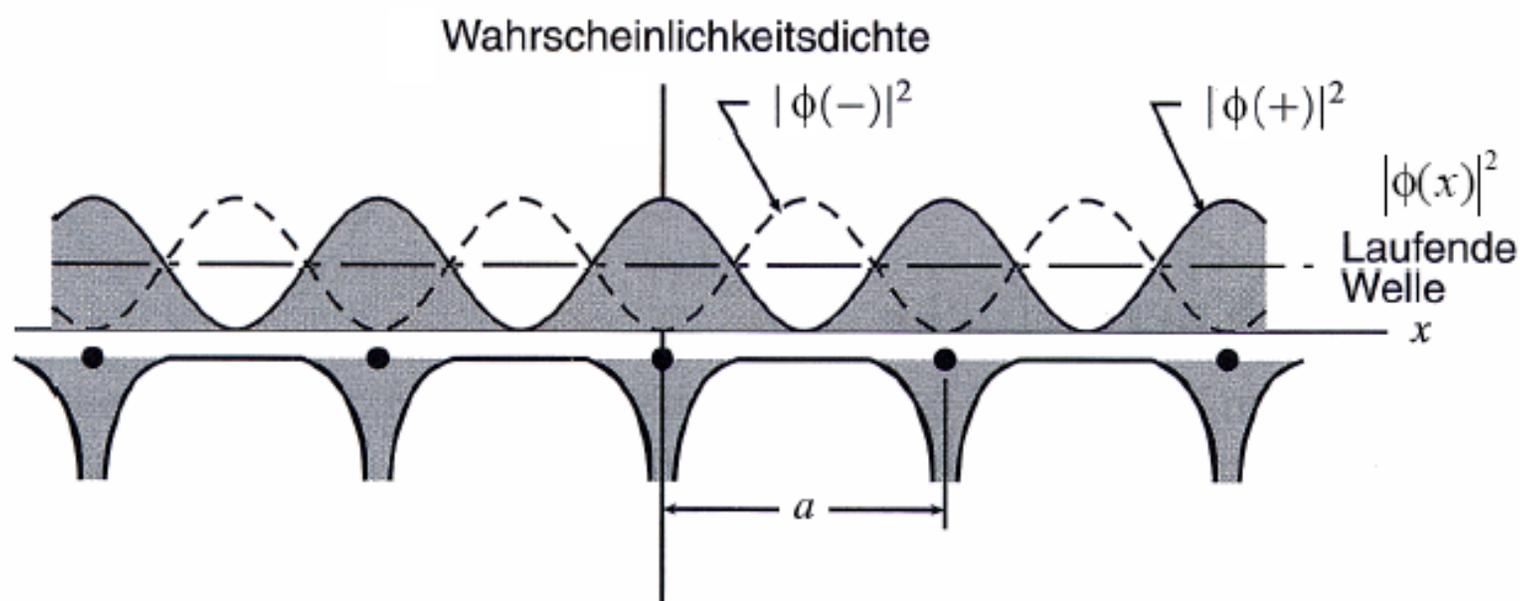
- Das Gitter moduliert die Aufenthaltswahrscheinlichkeit !



- (+) die Ladungsdichte der Elektronen ist näher an den Ionen
- (-) die Ladungsdichte der Elektronen ist dazwischen

→ potentielle Energie $E(+)$ < $E(-)$

Es entsteht das Gap (Lücke) in der Dispersion der elektronischen Zustände !
 Nähert man das Potenzial über die erste Fourier-Komponente $U(x) = -U_g \cos(2\pi x/a)$



Die Größe E_g der Energielücke läßt sich über den Erwartungswert der potentiellen Energie $U(x)$ grob abschätzen:

Wir setzen vereinfacht: $U(x) = -U_G \cos(2\pi x/a)$

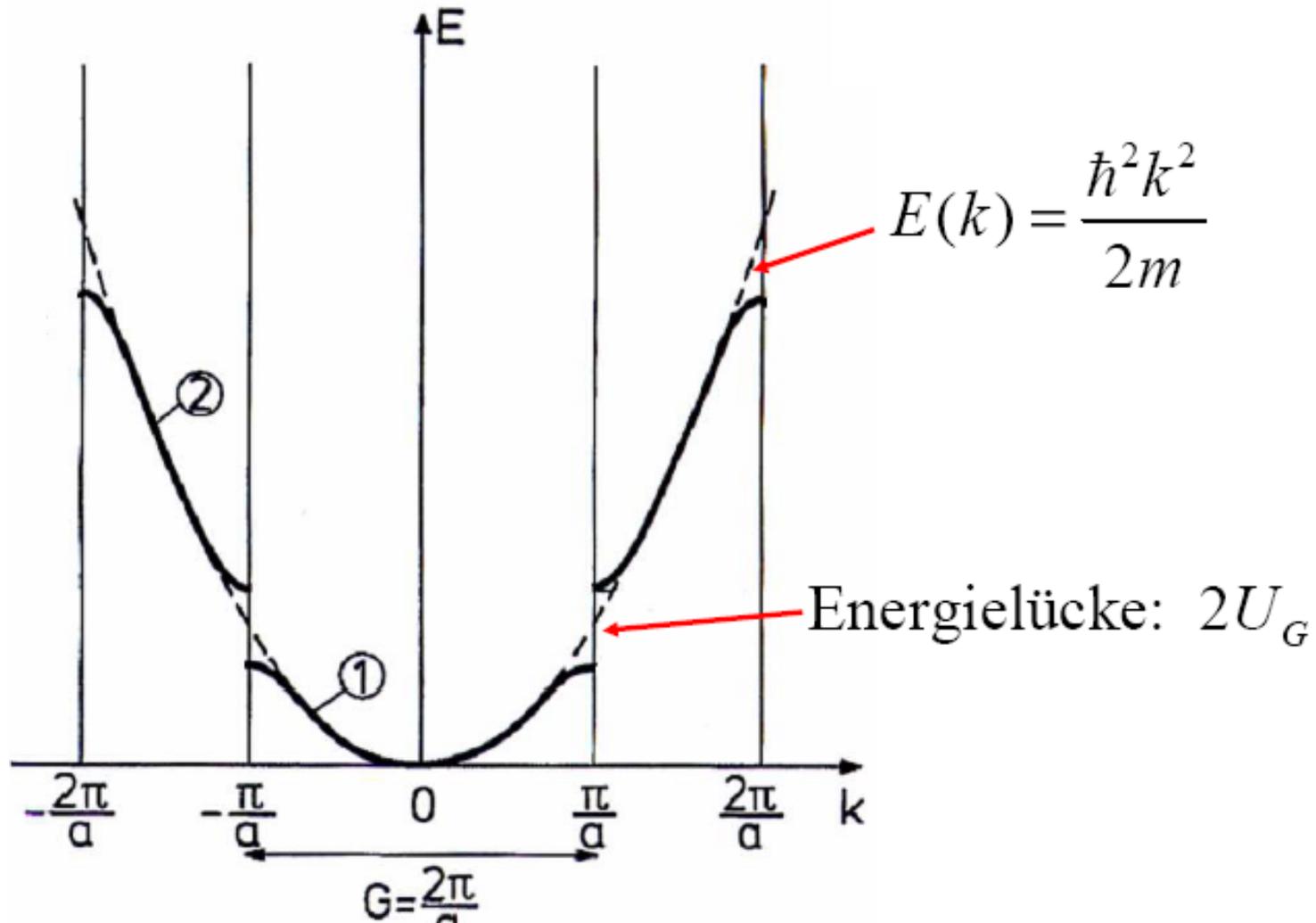
Wellenfunktionen: $\phi(+)=\sqrt{2/a} \cos(\pi x/a)$, $\phi(-)=\sqrt{2/a} \sin(\pi x/a)$

$$\Rightarrow E_g = \int_0^a U(x) (|\phi(-)|^2 - |\phi(+)|^2) dx$$

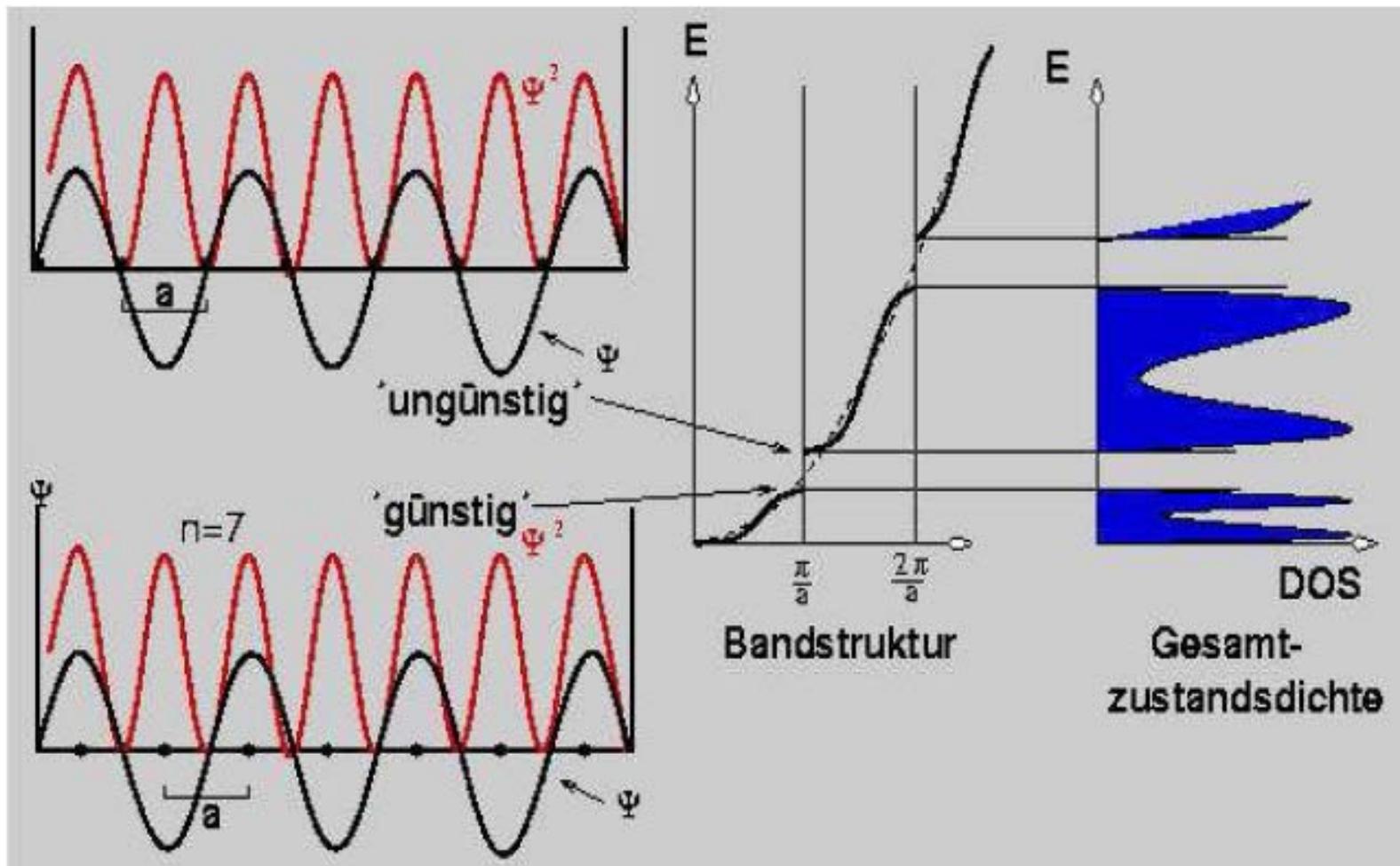
$$\Rightarrow E_g = -\frac{2U_G}{a} \int_0^a \cos(2\pi x/a) (\sin^2(\pi x/a) - \cos^2(\pi x/a)) dx$$

$$\Rightarrow E_g = \frac{2U_G}{a} \int_0^a \cos^2(2\pi x/a) dx = U_G$$

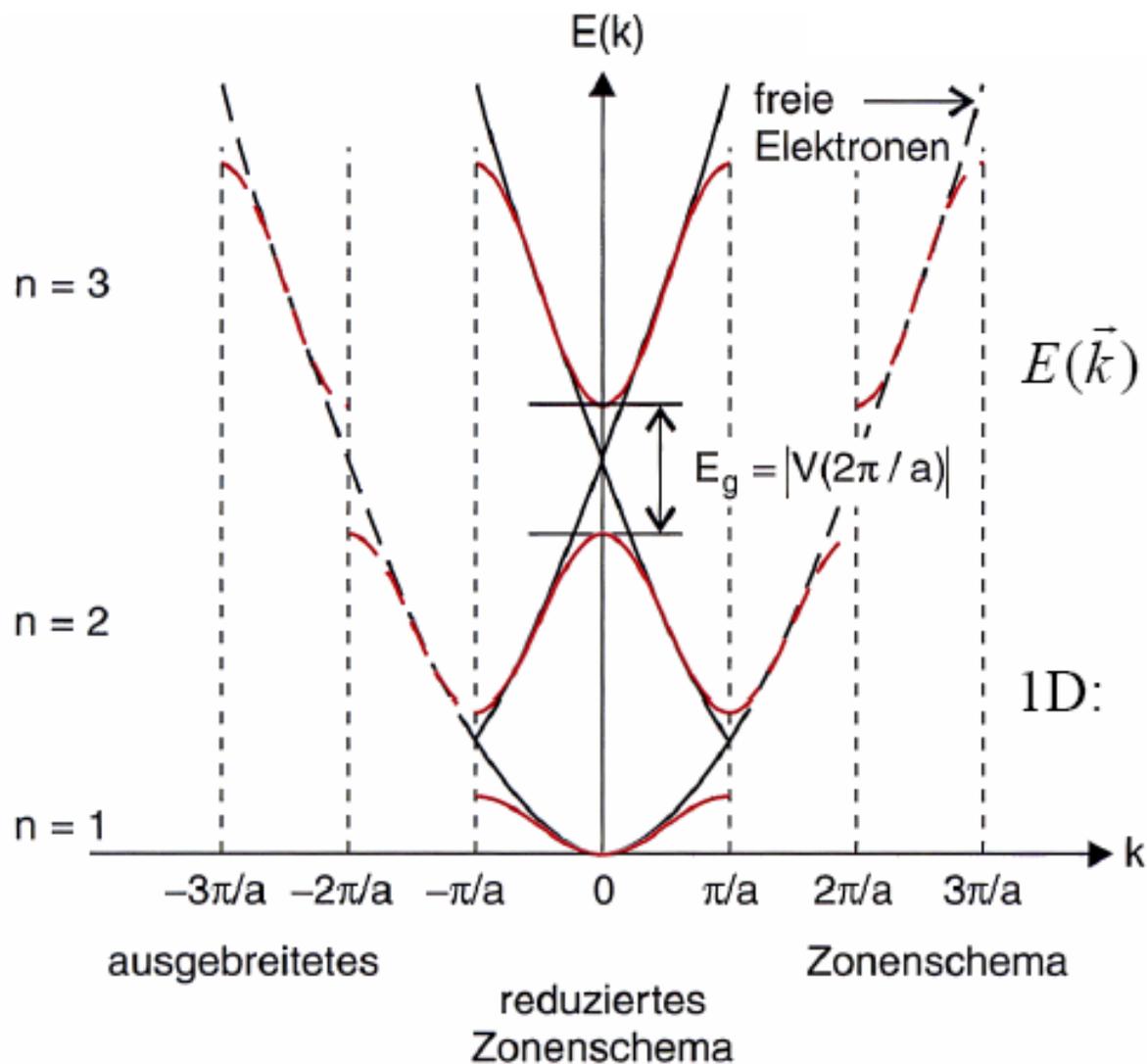
Energie-Lücke



Wie entstehen weitere Energie-Lücken ?



Reduziertes Zonen-Schema



$$E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \vec{k}^2$$

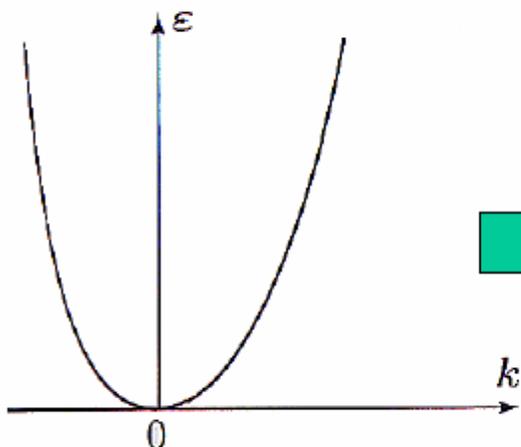
$$= \frac{\hbar^2}{2m} \cdot |\vec{k} + \vec{G}|^2$$

1D: $G = n \cdot \frac{2\pi}{a}$

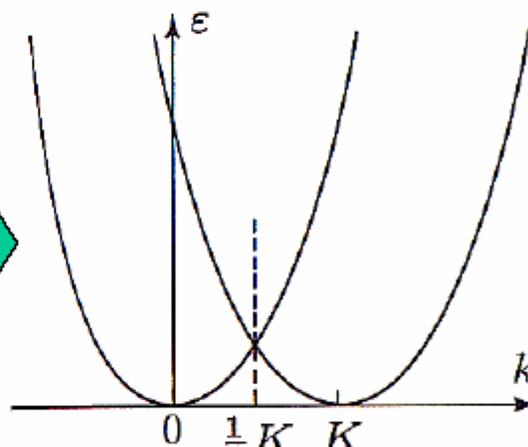
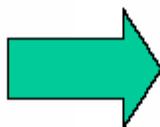
Rekapitulation der ein-dimensionalen Betrachtung :

$$E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \vec{k}^2$$

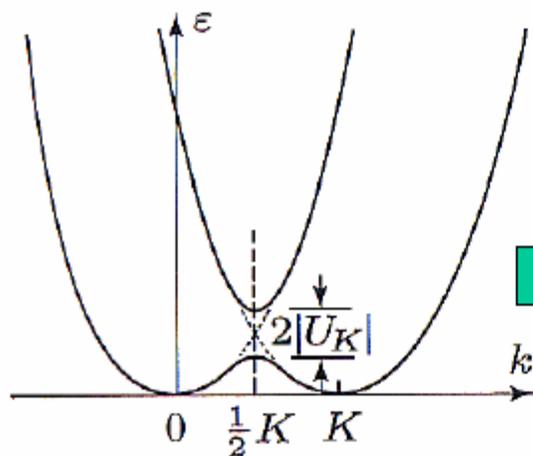
$$E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot |\vec{k} + \vec{G}|^2$$



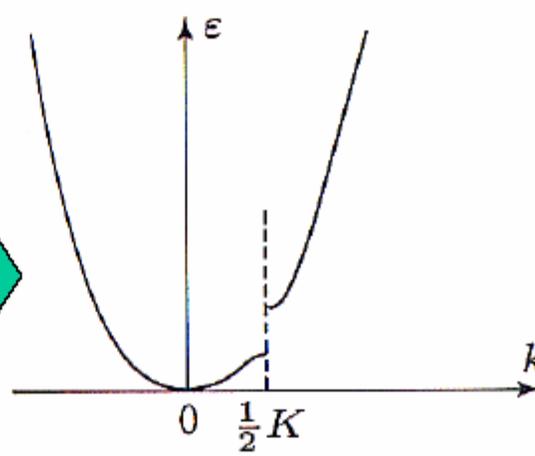
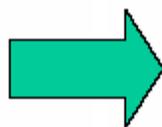
(a)



(b)

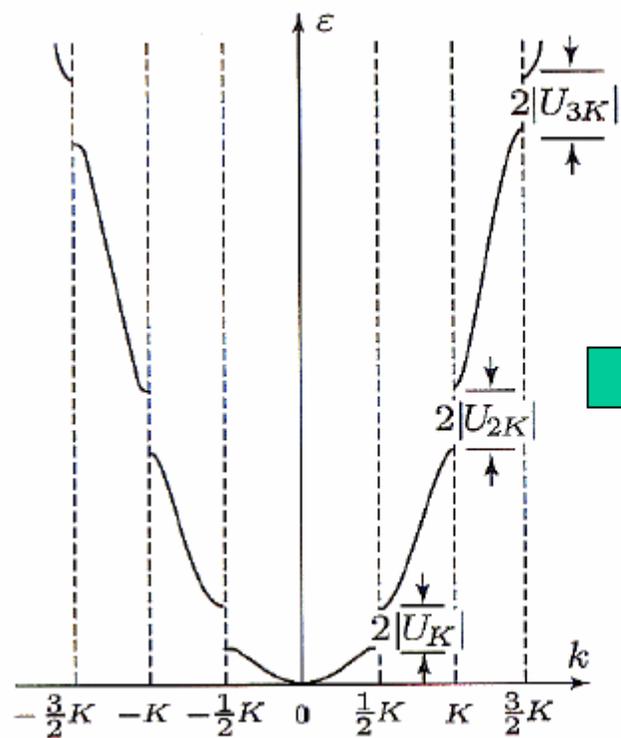


(c)



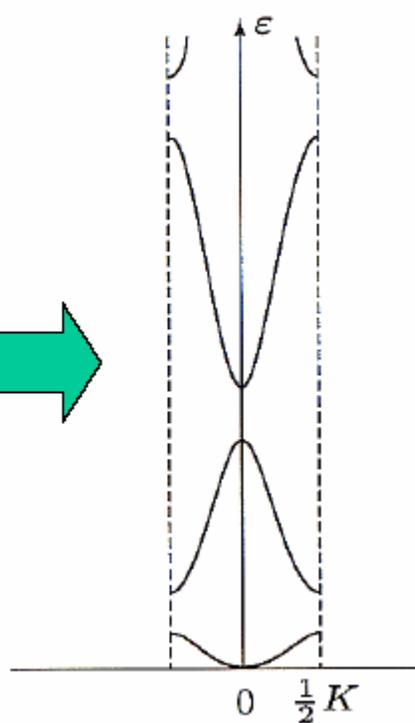
(d)

Erweitertes Zonenschema



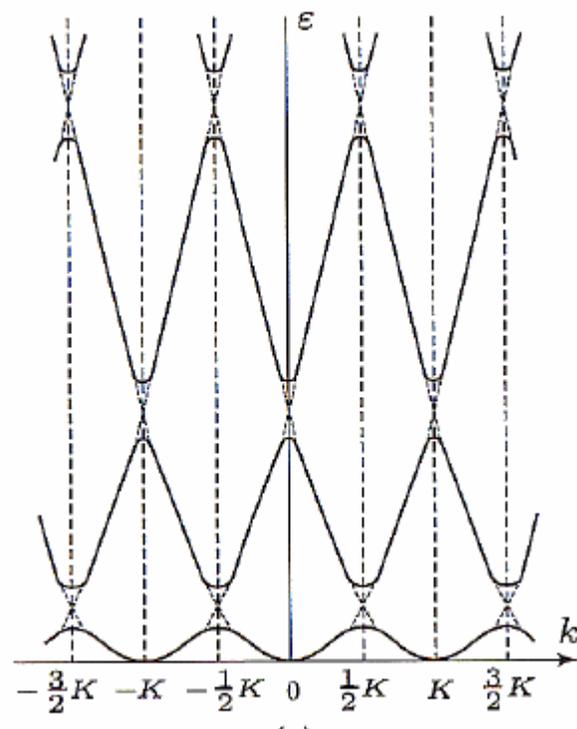
(e)

Reduziertes Zonenschema



(f)

Periodisches Zonenschema



(g)

VII.2 Bloch-Funktionen

VII.2.1 Bloch-Theorem

Bloch-Theorem : Die Lösungen der Schrödinger-Gleichung für ein periodisches Potenzial haben die spezielle Form :

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \cdot \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) \quad (7.1)$$

wobei $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ die Periodizität des Gitters besitzt.

also $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}+\mathbf{T})$ für \mathbf{T} einen Gittervektor

Bemerkungen : (7.1) ist eine Blochfunktion

$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ hängt von \mathbf{k} ab !

VII.2.2 Wechselwirkung eines Elektrons in einem periodischen Potenzial

- $U(\mathbf{x})$ sei das Potenzial in einem periodischen Gitter $U(\mathbf{x})=U(\mathbf{x}+\mathbf{a})$

- eine translationssymmetrische Funktion kann man als Summe darstellen

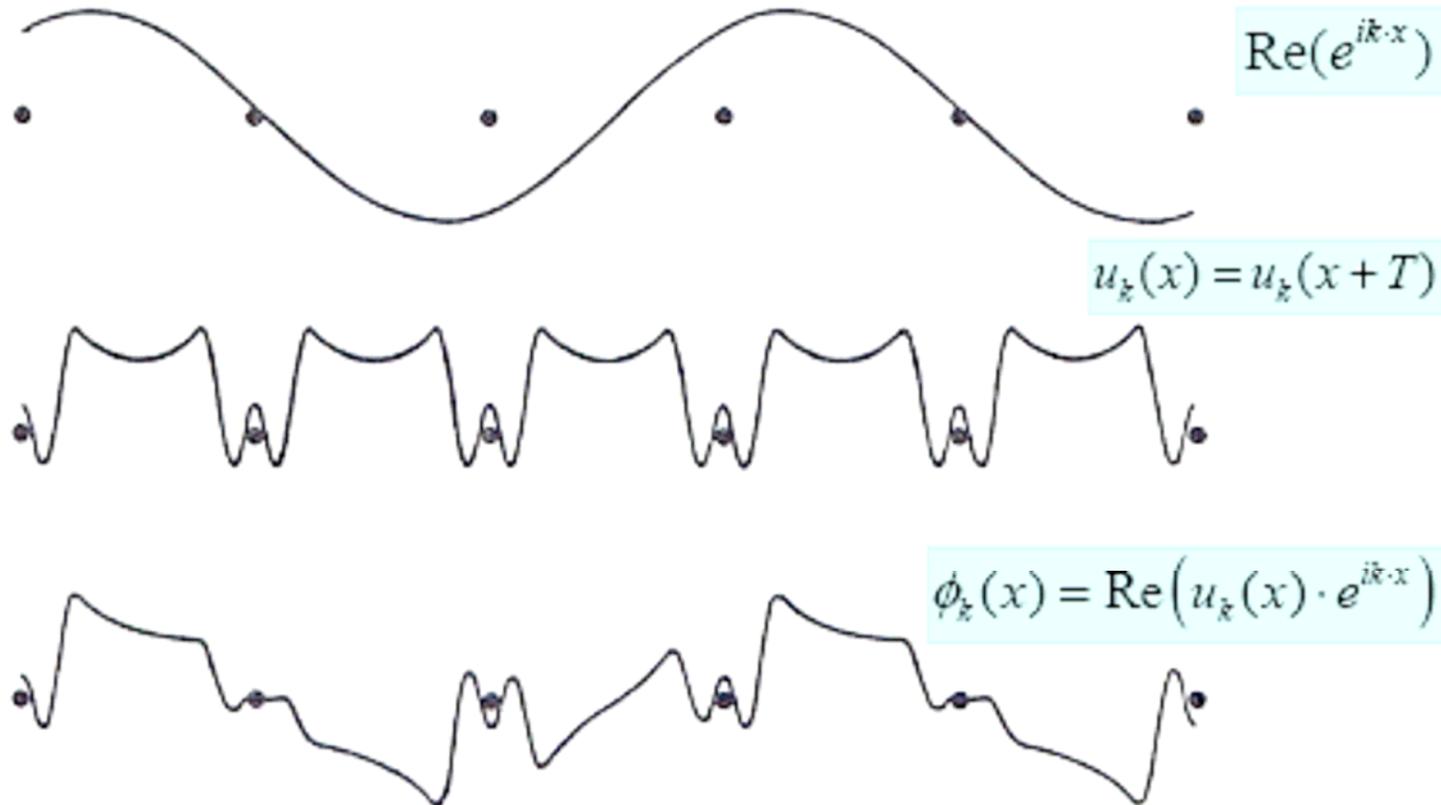
$$U(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{G}} U_{\mathbf{G}} \cdot \exp(i\mathbf{G}\mathbf{x}) \quad \text{wobei } U(\mathbf{x}) \text{ reell sein muss}$$

$$U(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{G}>0} U_{\mathbf{G}} \cdot [\exp(i\mathbf{G}\mathbf{x}) + \exp(-i\mathbf{G}\mathbf{x})] = 2 \sum_{\mathbf{G}>0} U_{\mathbf{G}} \cdot \cos(\mathbf{G}\mathbf{x}) \quad \text{mit } U_0=0$$

damit wird die Schrödingergleichung :

$$\{1/2m p^2 + U(\mathbf{x})\} \cdot \Psi(\mathbf{x}) = \{1/2m p^2 + \sum_{\mathbf{G}} U_{\mathbf{G}} \cdot \exp(i\mathbf{G}\mathbf{x})\} \cdot \Psi(\mathbf{x}) = E \cdot \Psi(\mathbf{x}) \quad (7.2)$$

Veranschaulichung einer Bloch-Welle



-Weiterhin gilt die **Ein-Elektron-Näherung**:

Das Elektron spürt die Ionenrümpfe und ein mittleres Potenzial der übrigen Leitungselektronen.

$$\Psi = \sum_{\mathbf{k}} C(\mathbf{k}) \cdot \exp(i\mathbf{k}\mathbf{x}) \quad (7.3), \text{ wobei } \mathbf{k} \text{ über die erlaubten Wellenvektoren läuft}$$
$$\mathbf{k} = \mathbf{n} \cdot 2\pi/L$$

Frage : Welche $C(\mathbf{k})$ können in (7.3) auftreten?

Wenn $C(\mathbf{k})$ endlich ist, dann können auch alle $\mathbf{k}+\mathbf{G}$ mit \mathbf{G} rez. Gittervektor auftreten!

Bedeutung : Das periodische Potenzial koppelt Wellenfunktionen deren Wellen-Vektoren um \mathbf{G} differieren!

→ Man kann das \mathbf{k} in der ersten Brillouin-Zone wählen : $-\pi/a < \mathbf{k} < \pi/a$

Setze nun (7.3) in (7.2) ein :

$$\text{Kinetische Energie: } \{1/2m p^2\} \cdot \Psi(\mathbf{x}) = 1/2m \{-i\hbar \cdot d/dx\} \Psi(\mathbf{x}) = \hbar^2/2m \sum_{\mathbf{k}} k^2 C(\mathbf{k}) \cdot \exp(i\mathbf{k}\mathbf{x})$$

$$\text{Potentielle Energie : } \{ \sum_{\mathbf{G}} U_{\mathbf{G}} \cdot \exp(i\mathbf{G}\mathbf{x}) \} \cdot \Psi(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{G}} \sum_{\mathbf{k}} U_{\mathbf{G}} \cdot C(\mathbf{k}) \cdot \exp(i\mathbf{G}\mathbf{x}) \cdot \exp(i\mathbf{k}\mathbf{x})$$

Wellengleichung :

$$\hbar^2/2m \sum_{\mathbf{k}} k^2 C(\mathbf{k}) \cdot \exp(i\mathbf{k}\mathbf{x}) + \sum_{\mathbf{G}} \sum_{\mathbf{k}} U_{\mathbf{G}} \cdot C(\mathbf{k}) \cdot \exp(i(\mathbf{G}+\mathbf{k})\mathbf{x}) = E \cdot \sum_{\mathbf{k}} C(\mathbf{k}) \cdot \exp(i\mathbf{k}\mathbf{x}) \quad (7.4)$$

-Die Fourierkomponenten in (7.4) müssen gleich sein :

mit $\lambda_k := \hbar^2 k^2 / 2m$ ergibt sich eine lineare Gleichung (für jedes k):

$$(\lambda_k - E) C(k) + \sum_{\mathbf{G}} U_{\mathbf{G}} \cdot C(k - \mathbf{G}) = 0 \quad (7.5)$$

Gleichung (7.5) verknüpft also k und $k - \mathbf{G}$ über die die Fourier-Koeffizienten $U_{\mathbf{G}}$. Im allgemeinen wird $U_{\mathbf{G}}$ schnell abfallen, das heißt nur wenige Terme sind zu berücksichtigen.

VII.2.3 Beweis der Kompatibilität mit dem Bloch-Theorems

$$\begin{aligned} \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) &= \sum_{\mathbf{G}} C(\mathbf{k} - \mathbf{G}) \cdot \exp(i[\mathbf{k} - \mathbf{G}]\mathbf{x}) = \{ \sum_{\mathbf{G}} C(\mathbf{k} - \mathbf{G}) \cdot \exp(-i\mathbf{G}\mathbf{x}) \} \cdot \exp(i\mathbf{k}\mathbf{x}) \\ &= u_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \cdot \exp(i\mathbf{k}\mathbf{x}) \end{aligned}$$

und $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})$ ist translationsinvariant.

VII.3 Quasiimpuls des Elektrons

k ist nicht mehr der Impuls der Elektronen-Wellenfunktion

$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})$ ist kein Eigenstand mehr !

Bedeutung :

a) Kristalltranslation $r \rightarrow r+T$

$$\Psi_{\mathbf{k}}(r+T) = u_{\mathbf{k}}(r+T) \cdot \exp(i\mathbf{k}r) \exp(i\mathbf{k}T) = \exp(i\mathbf{k}T) \Psi_{\mathbf{k}}(r) \quad \text{Phasen-Faktor !}$$

b) Verschwindet das Kristall-Potential

$$(\lambda_{\mathbf{k}} - E) C(\mathbf{k}) = 0 \quad (7.5) \rightarrow \text{alle } C(\mathbf{k}-\mathbf{G})=0 \text{ außer } C(\mathbf{k})$$

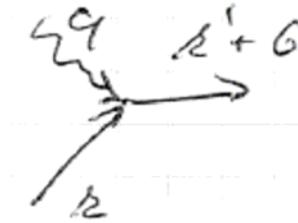
damit ist $\Psi_{\mathbf{k}}(r) = \exp(i\mathbf{k}r)$ entsprechend einem freien Elektron

c) k geht in die Erhaltungssätze ein :

$\hbar k$ – Quasiimpuls des Elektrons

Streuung an Phononen

$$\mathbf{k} + \mathbf{q} = \mathbf{k}' + \mathbf{G}$$



VII.4 Lösung der Hauptgleichung

im allgemeinen ist dies aufwendig, hier Vereinfachung

G kürzester G -Vektor, nur eine Fourier-Komponente $U_G = U_{-G} = U$

Matrix aus (7.5)

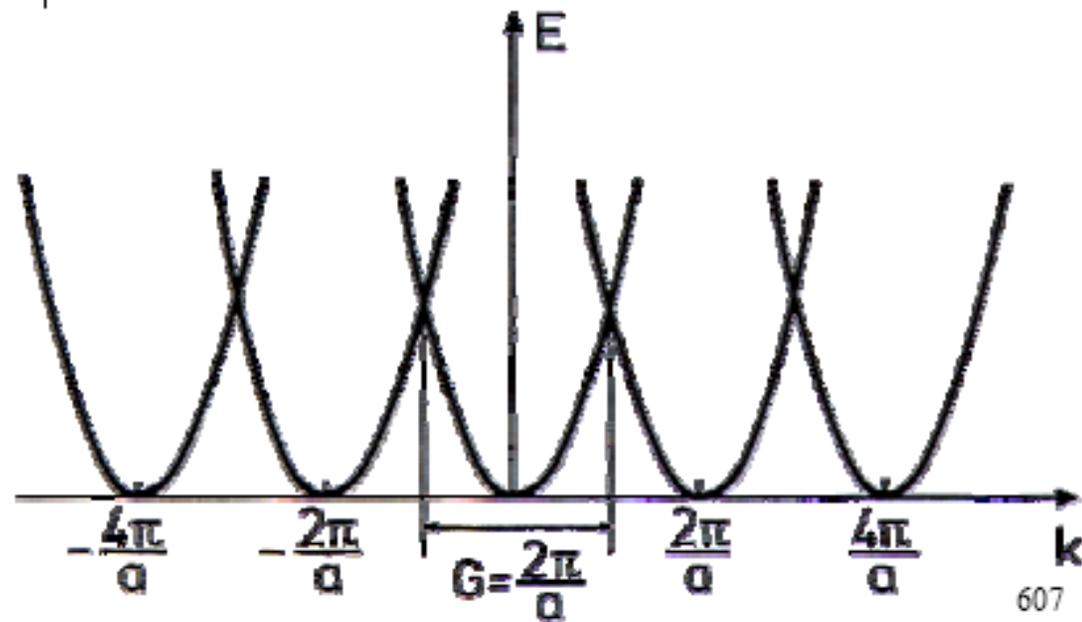
$$\begin{bmatrix} \lambda_{k-2G} - E & U & 0 & 0 & 0 \\ U & \lambda_{k-G} - E & U & 0 & 0 \\ 0 & U & \lambda_k - E & U & 0 \\ 0 & 0 & U & \lambda_{k+G} - E & U \\ 0 & 0 & 0 & U & \lambda_{k+2G} - E \end{bmatrix} \quad (7.6)$$

- Nur dieser Teil von (7.5) ist zu berücksichtigen.
- Die Lösung der Determinante von (7.6) liefert einen Satz von Energiewerten $E_n(\mathbf{K})$
- Näherung des leeren Gitters : wir betrachten die Energie des freien Elektrons in der ersten Brillouin-Zone, keine U's → Rückfaltung !

$$E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \vec{k}^2 = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot |\vec{k} + \vec{G}|^2 \quad \text{mit einem reziproken Gittervektor } \vec{G}.$$

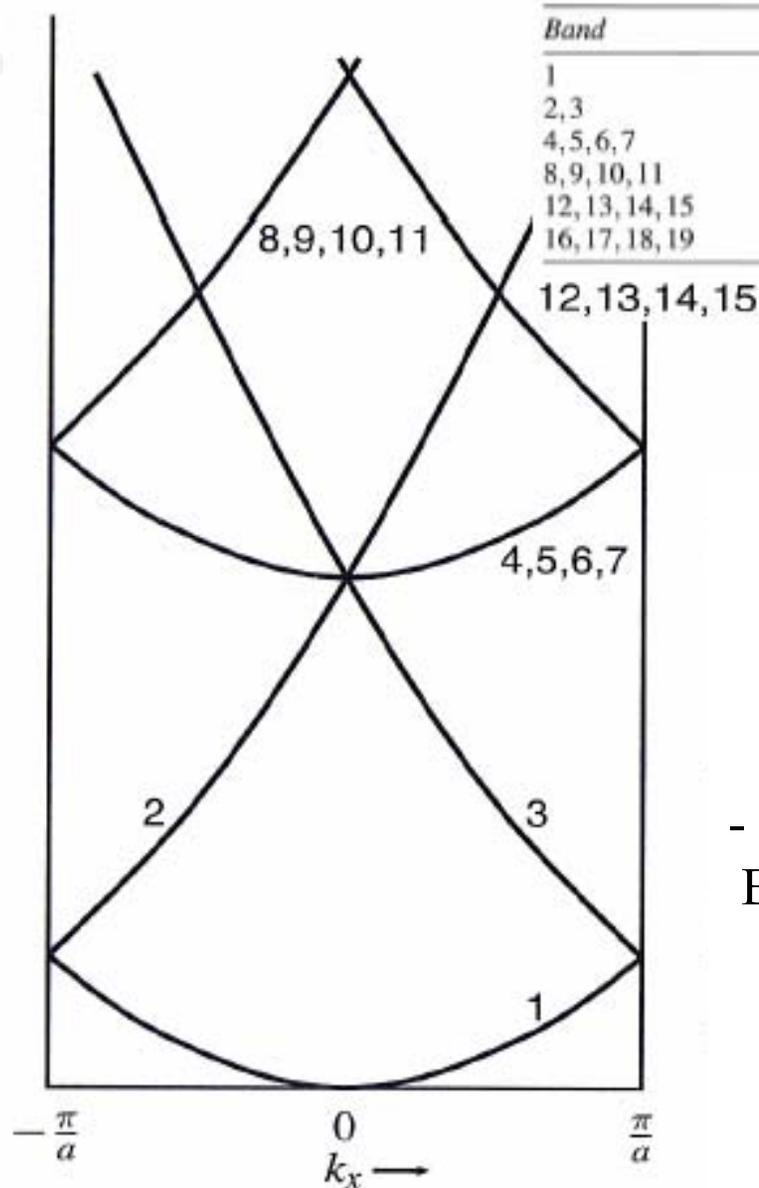
Für den 1D Fall

$$\text{ist: } G = n \cdot \frac{2\pi}{a}$$



607

- man faltet die Bänder zurück in die erste Brillouin-Zone !



Band	$Ga/2\pi$	E (000)	$E(k_x, 00)$
1	000	0	k_x^2
2,3	100, $\bar{1}00$	$(2\pi/a)^2$	$(k_x \pm 2\pi/a)^2$
4,5,6,7	010, 0 $\bar{1}$ 0, 001, 00 $\bar{1}$	$(2\pi/a)^2$	$k_x^2 + (2\pi/a)^2$
8,9,10,11	110, 101, $\bar{1}\bar{1}$ 0, 10 $\bar{1}$	$2(2\pi/a)^2$	$(k_x + 2\pi/a)^2 + (2\pi/a)^2$
12,13,14,15	$\bar{1}\bar{1}$ 0, $\bar{1}$ 01, $\bar{1}\bar{1}$ 0, $\bar{1}$ 0 $\bar{1}$	$2(2\pi/a)^2$	$(k_x - 2\pi/a)^2 + (2\pi/a)^2$
16,17,18,19	011, 0 $\bar{1}$ 1, 01 $\bar{1}$, 0 $\bar{1}$ $\bar{1}$	$2(2\pi/a)^2$	$k_x^2 + 2(2\pi/a)^2$

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$$

- man faltet die Bänder zurück in die erste Brillouin-Zone !

-Näherungslösung nahe einer Zonen-Grenze :

U_G sei klein gegenüber der kinetischen Energie :

$$k = 0.5G = \pi/a$$

Wenn $C(1/2G)$ ein wesentlicher Koeffizient ist, dann auch $C(-1/2G)$!

Wir betrachten nun die Gleichungen (7.5), die $C(1/2G)$ oder $C(-1/2G)$ enthalten :

$$\lambda := \lambda_{1/2G} = \hbar^2 G^2 / 8m$$

Damit ergibt sich :

$$(\lambda - E) C(1/2G) + U C(-1/2G) = 0$$

$$(\lambda - E) C(-1/2G) + U C(1/2G) = 0$$

Damit erhält man die Determinanten-Gleichung :

$$(\lambda - E)^2 = U^2 \quad \text{also} \quad E = \lambda \pm U !$$

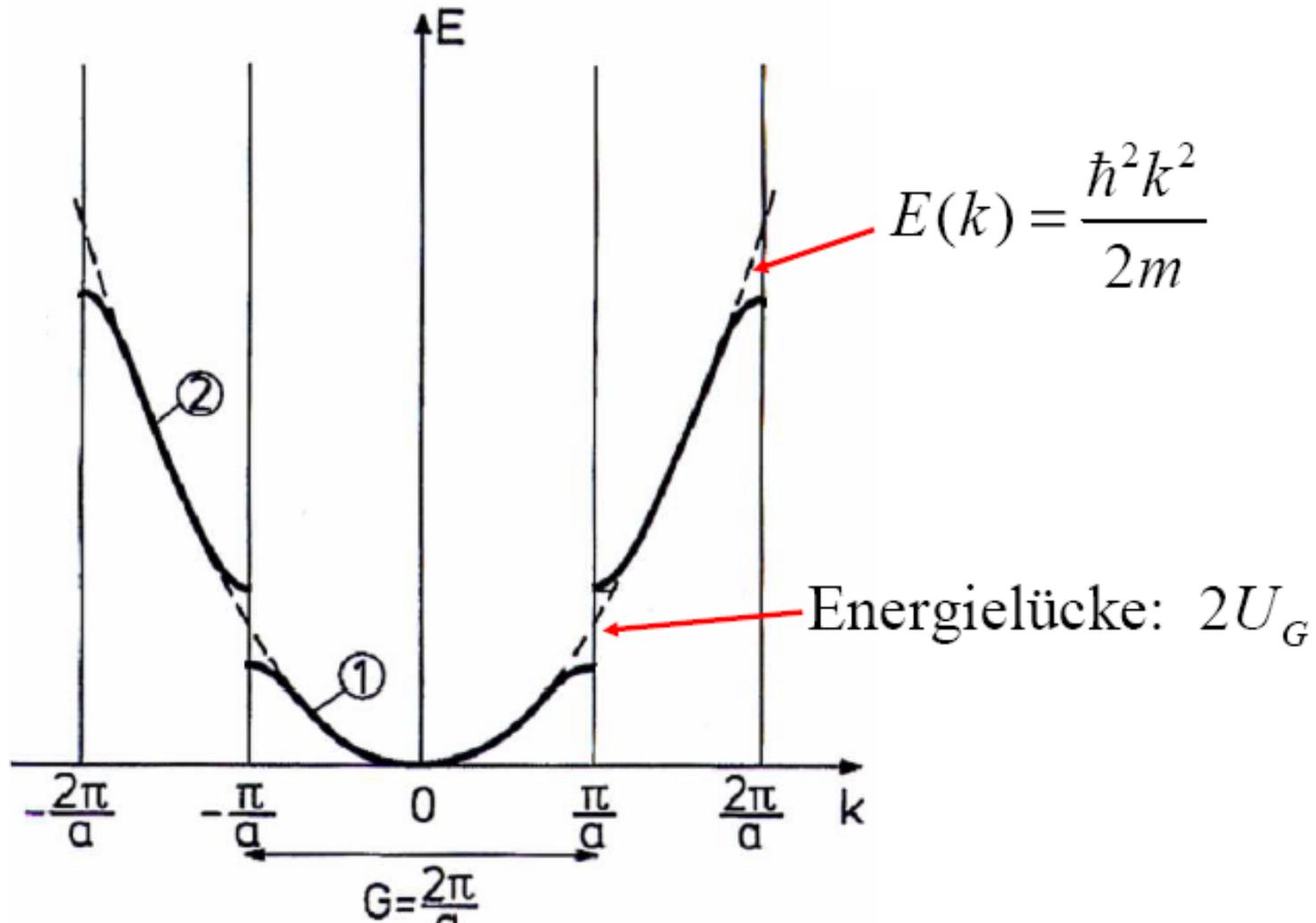
und für die Koeffizienten :

$$C(-1/2G) / C(1/2G) = (E - \lambda) / U = \pm 1$$

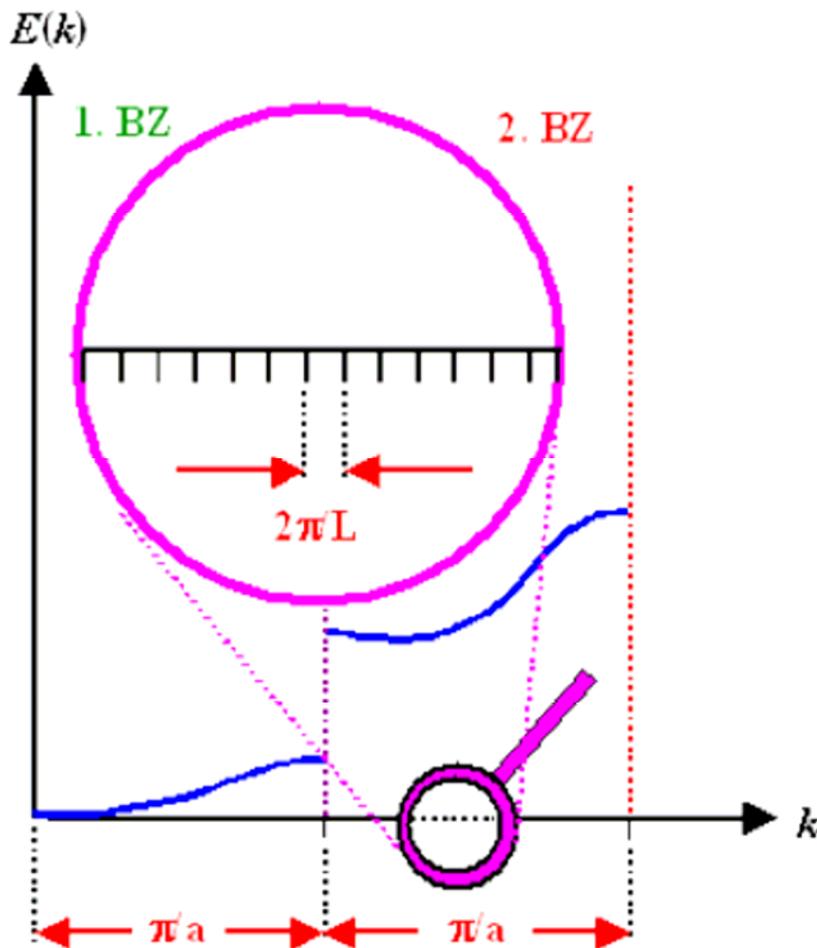
$$\Psi(x) = \exp(i1/2Gx) \pm \exp(-i1/2Gx)$$

auch für andere k nahe der Zonen-Grenze ergibt sich eine Aufspaltung $2U$.

Energie-Lücke



- Die Anzahl der Zustände in einem Band



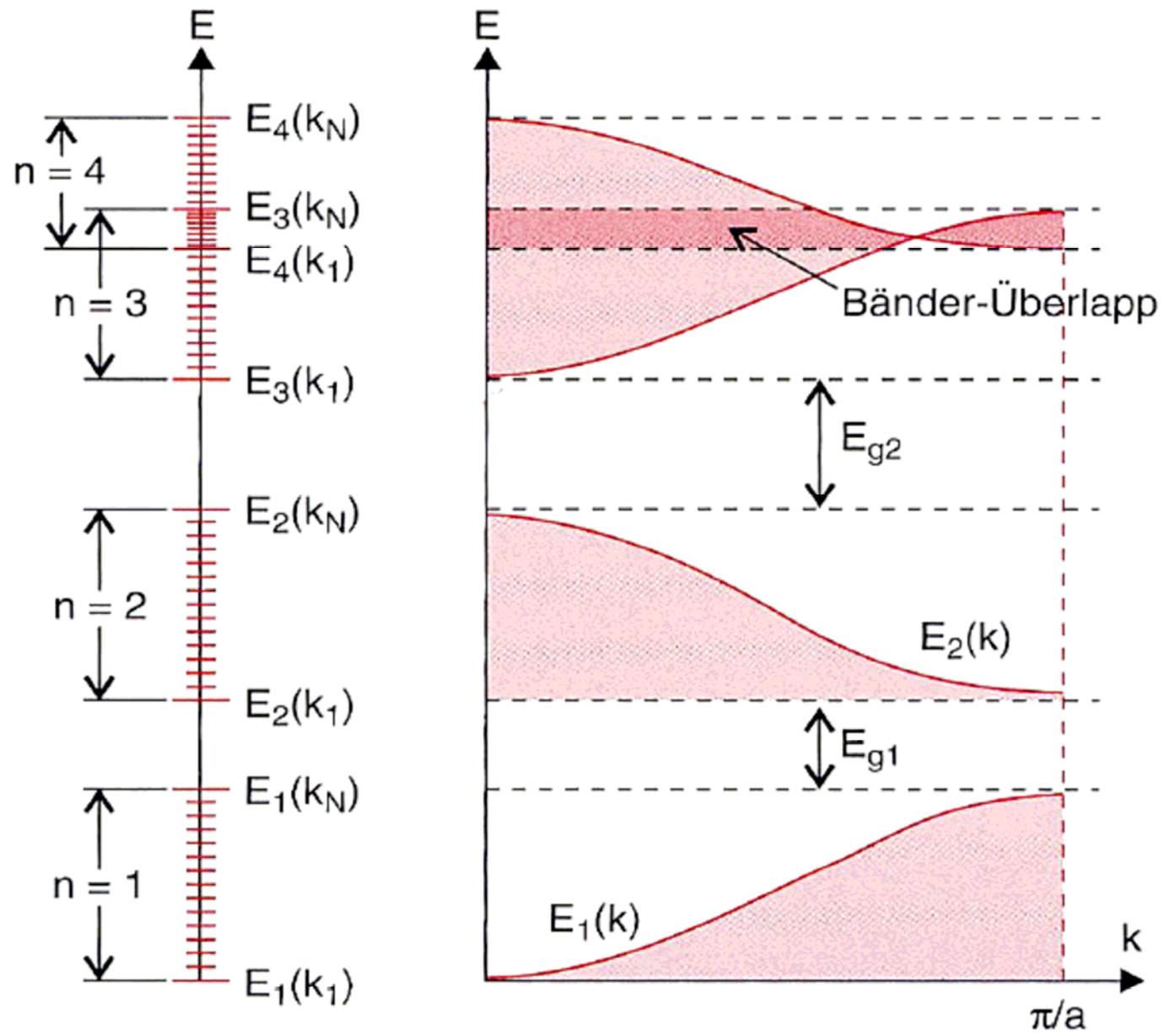
Die k -Werte sind wegen der Randbedingungen diskret.

Wir betrachten einen linearen Kristall mit der Gitterkonstante a , der aus N -Einheitszellen besteht:

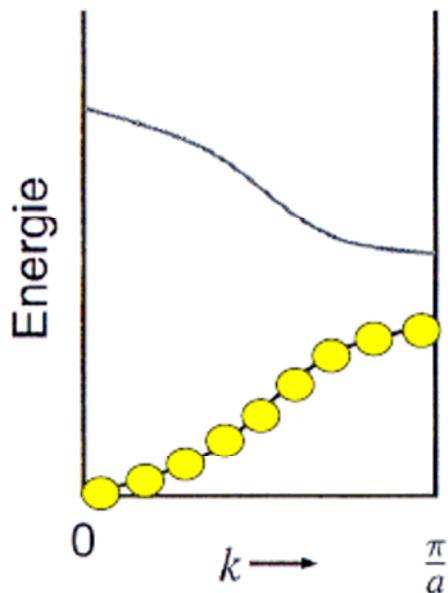
$$k = 0, \pm \frac{2\pi}{L}, \pm \frac{4\pi}{L}, \dots, + \frac{N\pi}{L} = \frac{N\pi}{Na} = \frac{\pi}{a}$$

$\Rightarrow N$ unabhängige k -Werte!

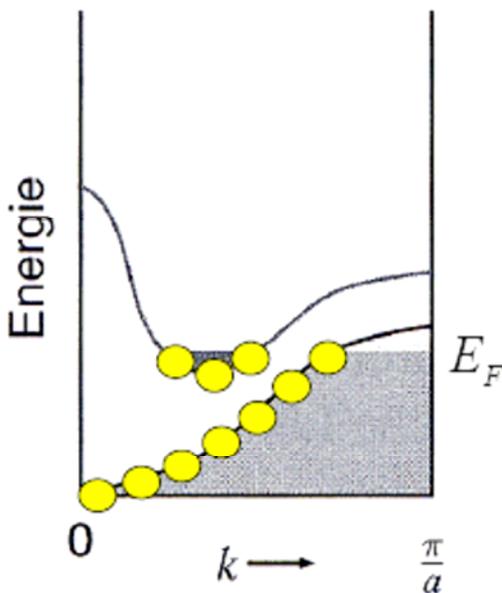
\Rightarrow Jede primitive Einheitszelle trägt mit einem unabhängigen k -Wert und 2 Zuständen (Spin!) zu jedem Energieband bei.



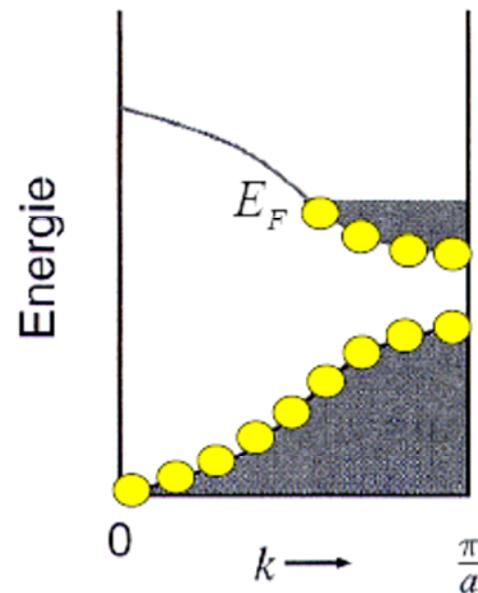
Ein Kristall ist ein **Isolator** → in einer primitiven Zelle liegt eine **gerade Anzahl von Elektronen** vor (Ohne Korrelationen)!



Besetzte Zustände
in einem Isolator
⇒ keine freien
Zustände !



Wegen Bandüberlapp
gibt es freie Zustände
im Leitungsband
⇒ Halbmetall & Metall

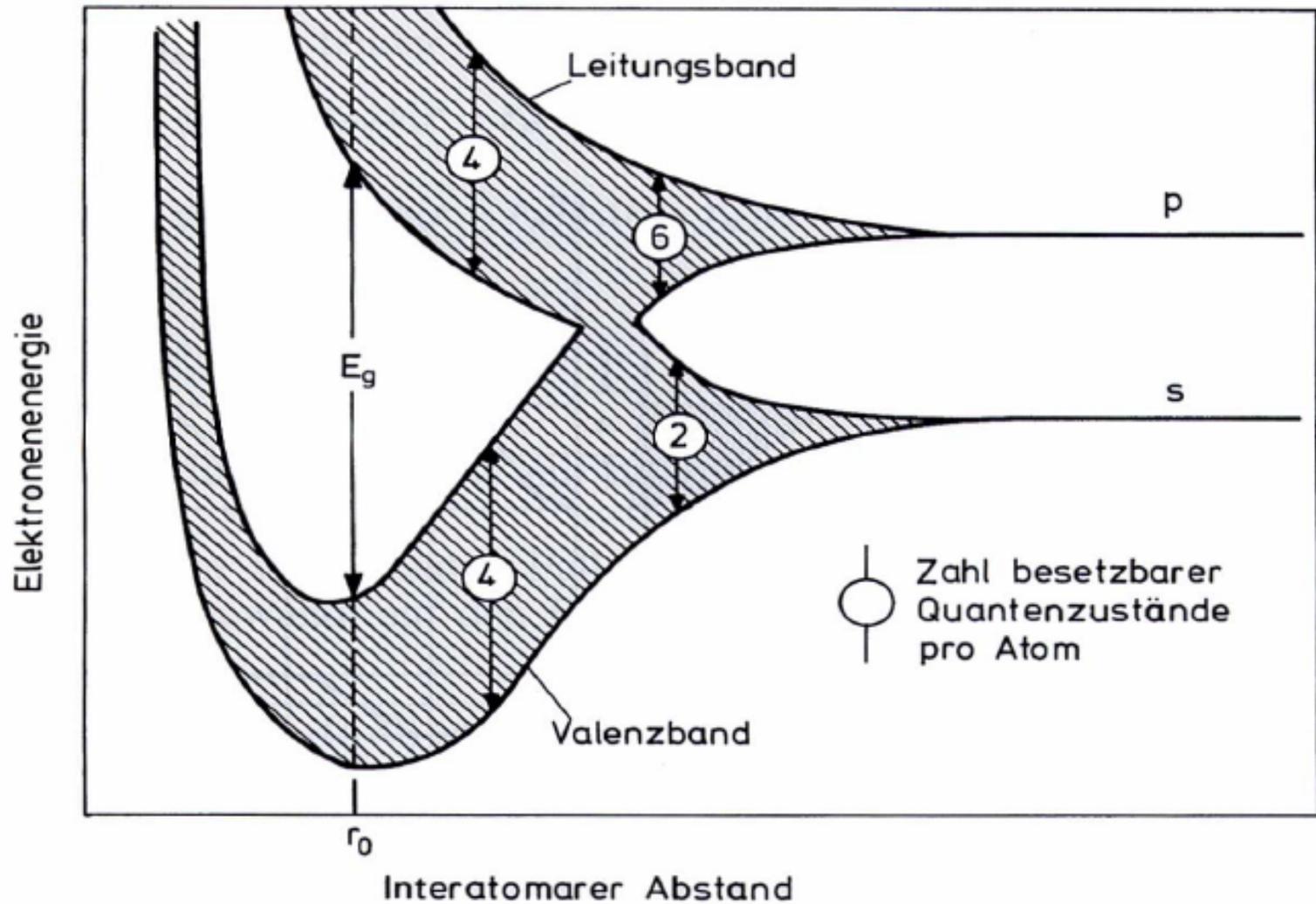


Höhere Elektronen-
konzentration ⇒
freie Zustände im
Leitungsband
⇒ Metall

-ACHTUNG : Korrelationen können die Bänder aufspalten.

Isolator auch mit nur einem Elektron pro Zelle, z.B. La_2CuO_4 !

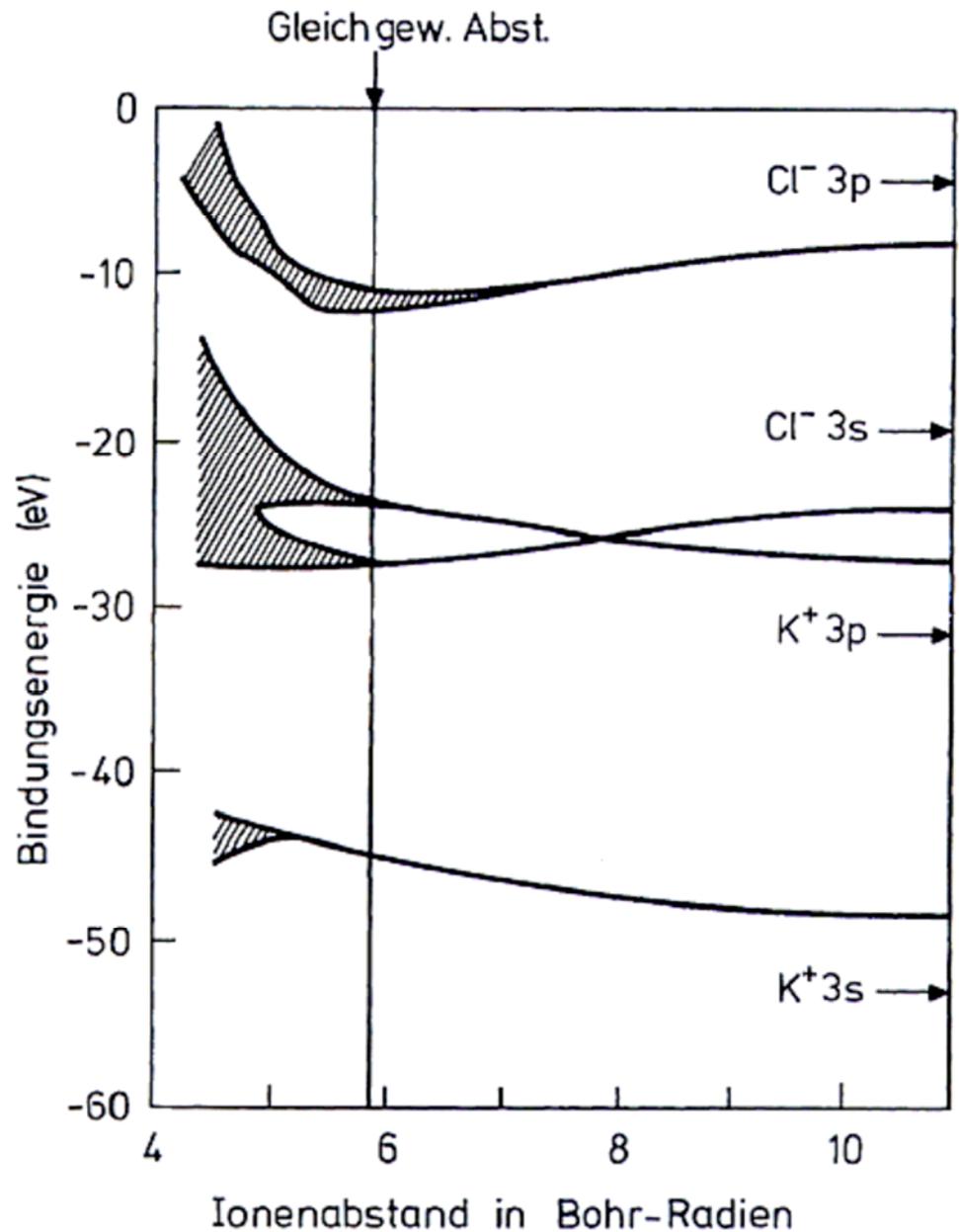
Schematischer Verlauf der Bandaufspaltung als Funktion des interatomaren Abstandes für Diamant, Silizium und Germanium



- Bandstruktur von KCl

Bei Ionenkristallen wie KCl ist die Bandaufspaltung äußerst gering. Man findet auch keinen Überlapp der Bänder. Erst bei sehr geringen Abständen der Ionen würden sich die Bänder überlappen, aber dann wäre die elektrostatische Abstoßung zu groß.

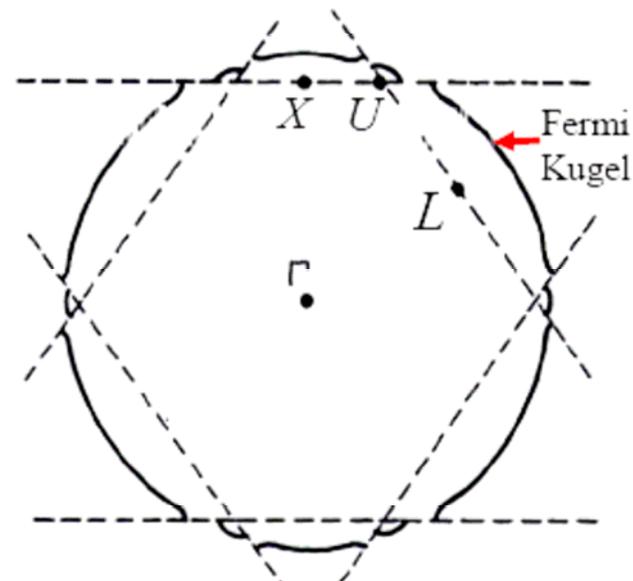
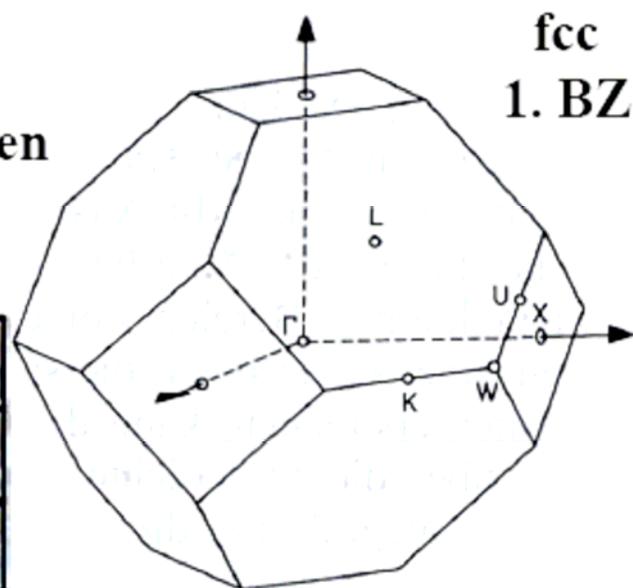
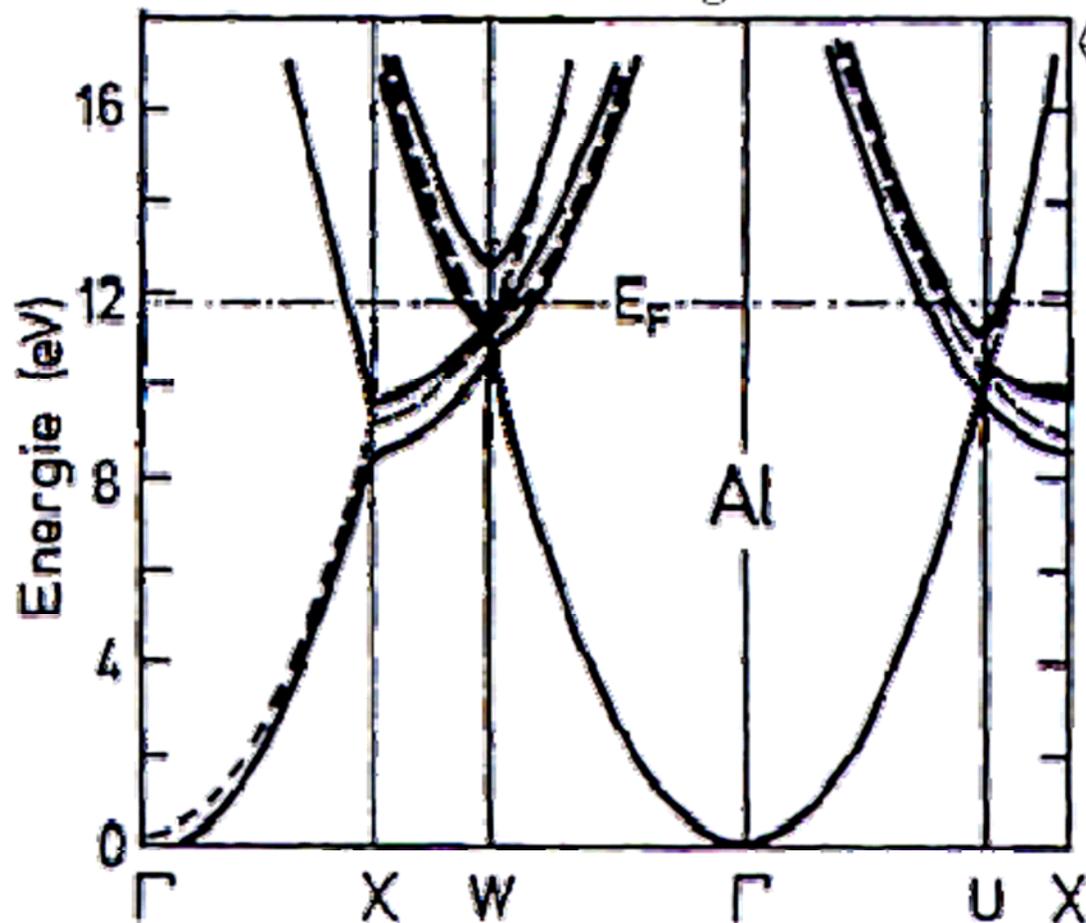
Benennung der Bänder nach den atomaren Niveaus: s,p,d Bänder



- Bandstruktur von einfachen Metallen : Al, Cu

Die Darstellung von $E(k)$ für Schnitte entlang hochsymmetrischer Richtungen in der 1. Brillouin-Zone am Beispiel der elektronischen Struktur von Aluminium (fcc).

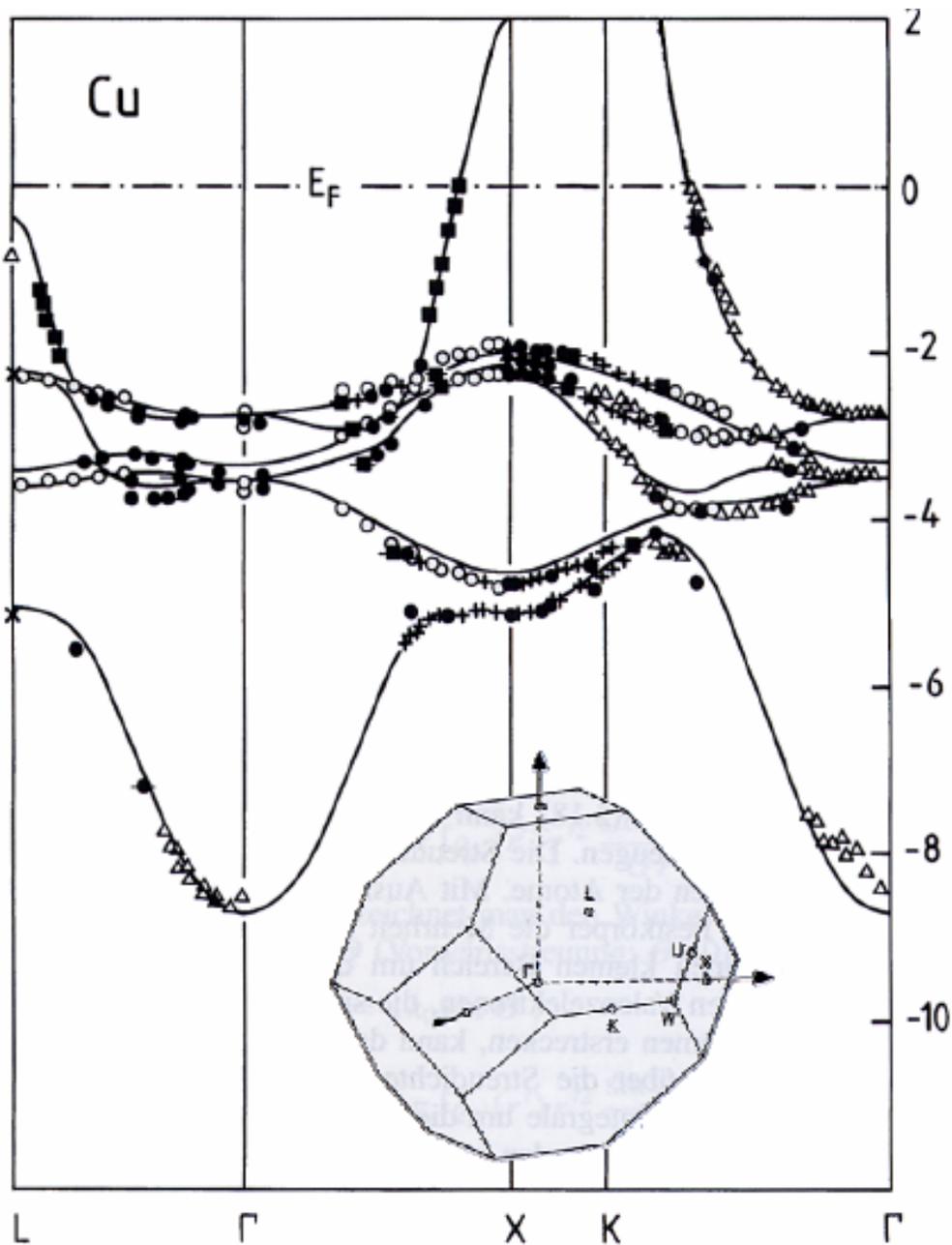
Gestrichelt = freies Elektronengas



Bandstruktur $E(k)$ längs
Richtungen hoher Kristall-
symmetrie für Kupfer.

Die experimentellen Daten
(Symbole) stimmen sehr gut
mit der berechneten Band-
struktur (Linien) überein.
Die d-Elektronen erzeugen sehr
flache Bänder und sorgen für
deutliche Abweichungen vom
Verhalten freier Elektronen.
Die 1. Brillouin-Zone mit
den entsprechenden Richtungen
ist im unteren Teil gezeigt.

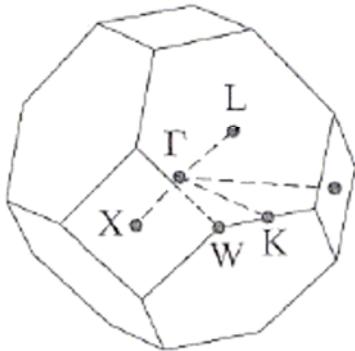
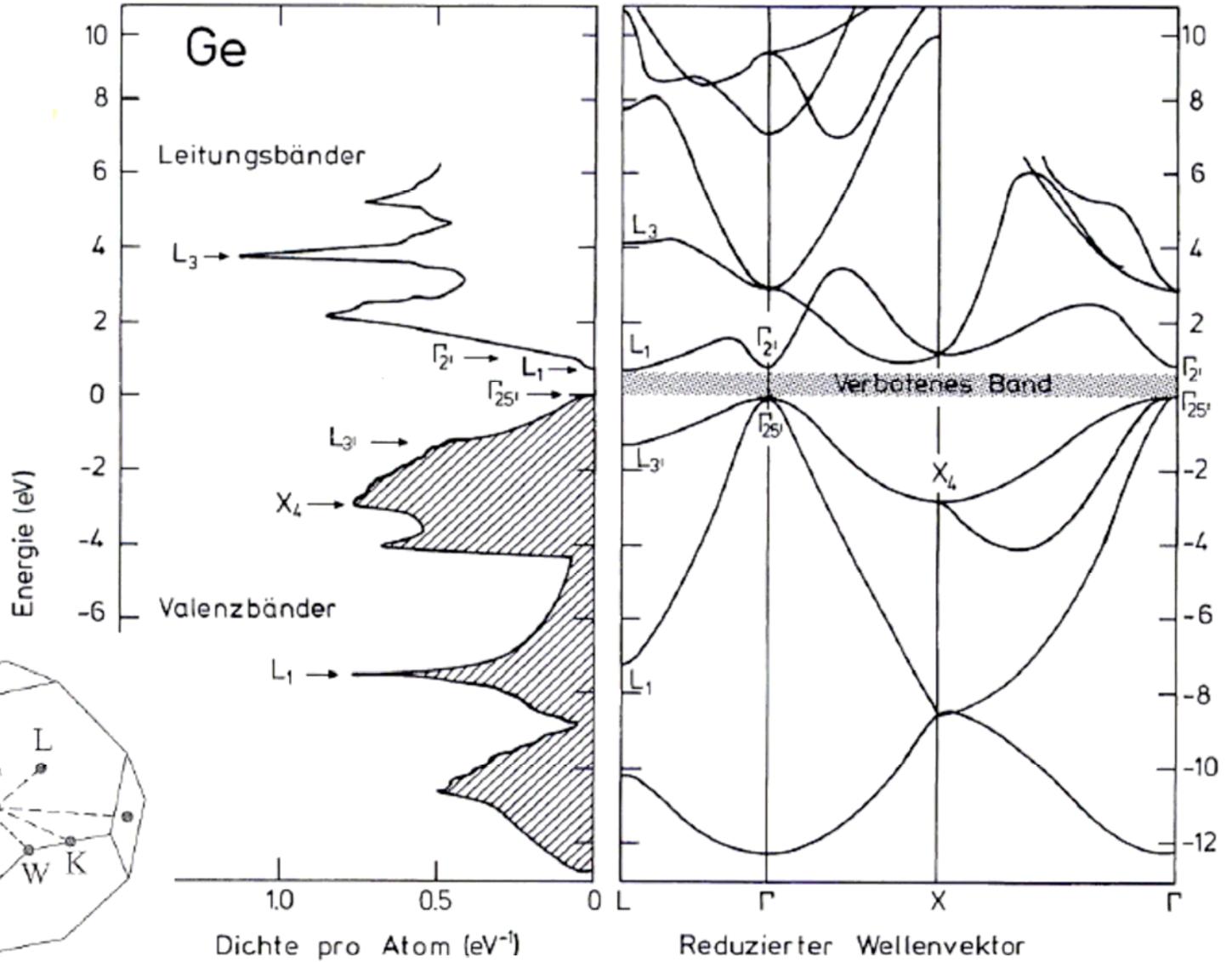
Daten zusammengestellt von
Courths & Hüfner
Phys. Rep. 112, 55 (1984)



- Bandstruktur von einfachen Halbleitern : Ge

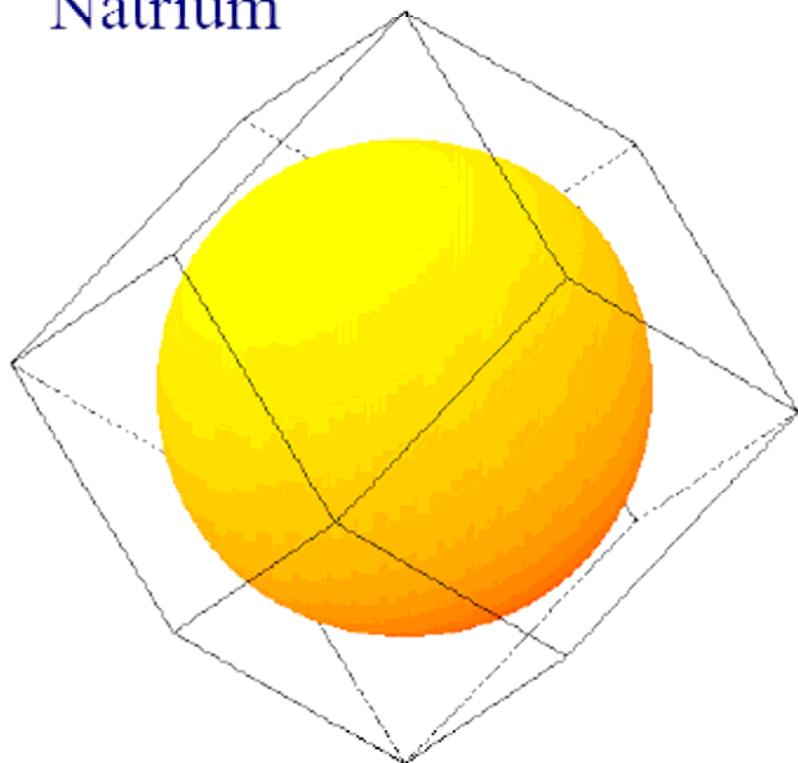
Zustandsdichte

Bandstruktur

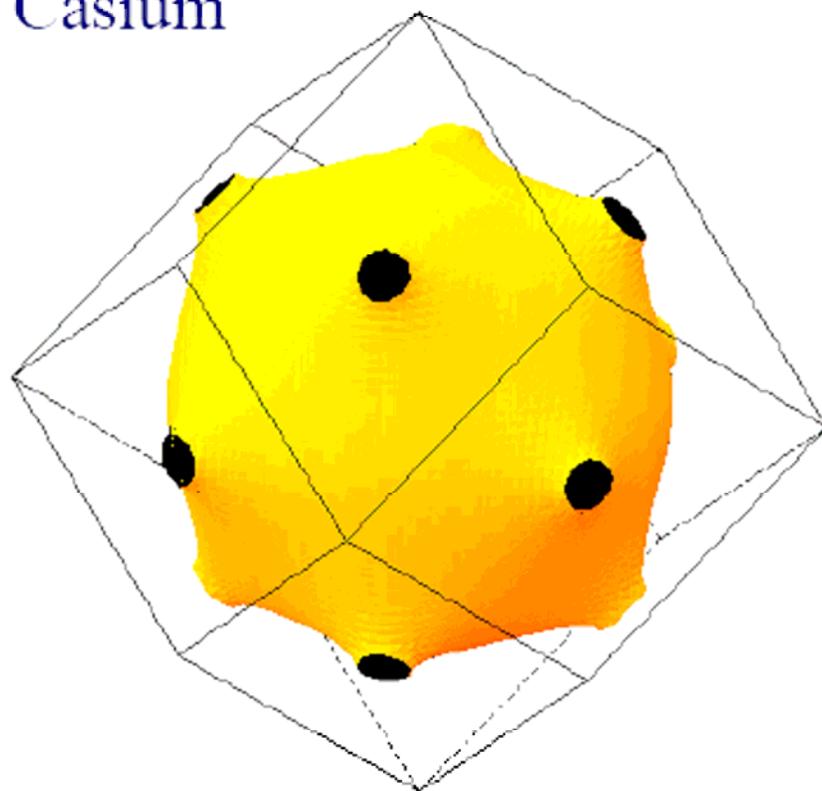


Fermi-Flächen von Alkalimetallen

Natrium



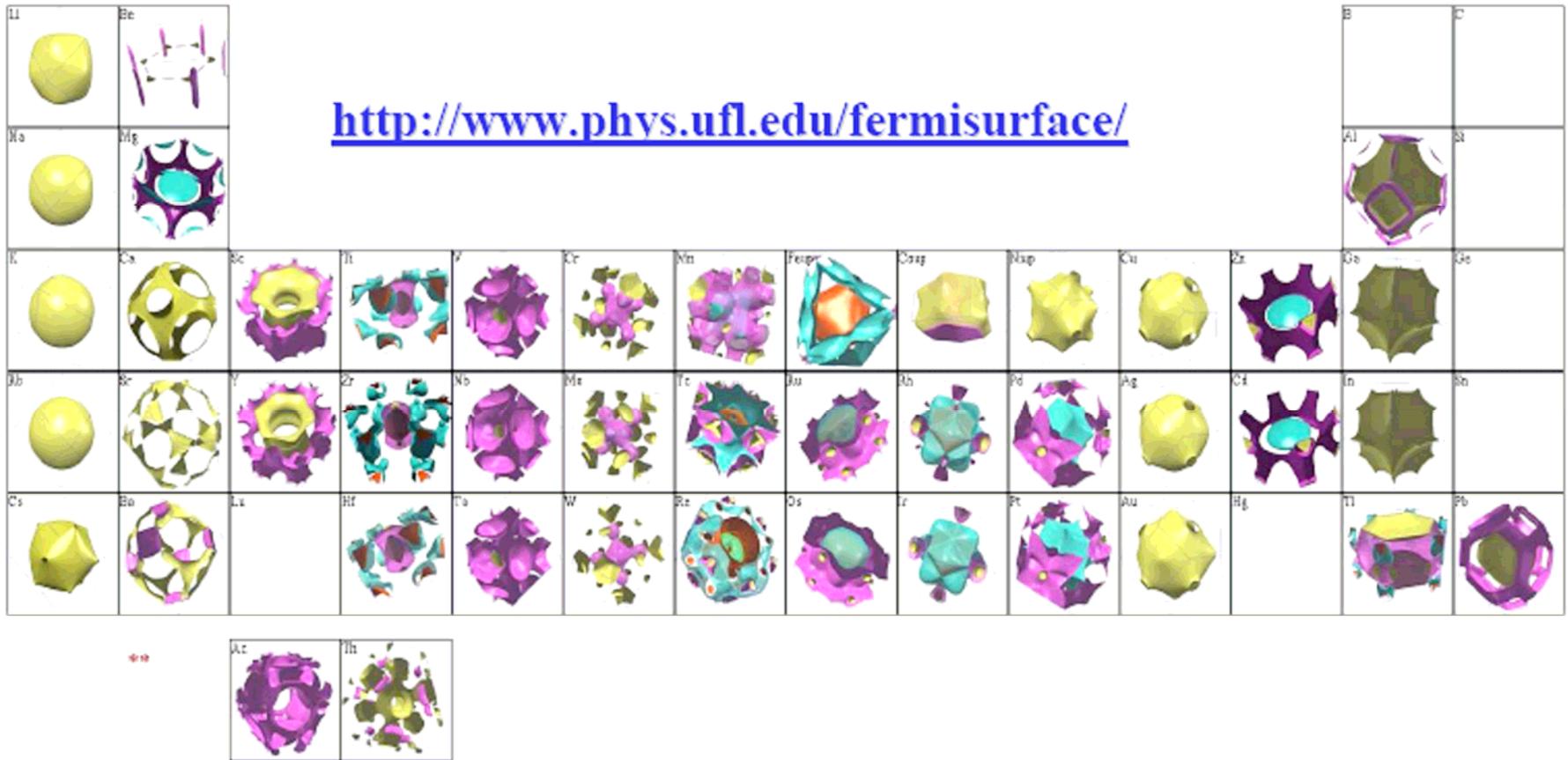
Cäsium



<http://www.phy.tu-dresden.de/~fermisur/>

Fermi-Flächen in Metallen:

Auch in komplexeren Metallen bilden die k-Werte der höchsten besetzten Zustände bei $T=0$ eine Fläche =: Fermi-Fläche



Ferromagnets :

