

7 Das freie Elektronengas

A7.1 Fermi-Gase in d Dimensionen



Geben Sie für ein d -dimensionales Fermi-Gas die Fermi-Wellenzahl k_F , die Fermi-Geschwindigkeit v_F , die Fermi-Energie ϵ_F und die Zustandsdichte an der Fermi-Kante $D_d(\epsilon)$ für beide Spin-Richtungen an.

Lösung:

Wir gehen von einem d -dimensionalen Hyperkubus mit der Kantenlänge L und dem Volumen L^d aus. Die Schrödinger-Gleichung für freie Elektronen hat die Form

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \left[\sum_{i=1}^d \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} \right] \Psi(x_1, x_2, \dots, x_d) = \epsilon \Psi(x_1, x_2, \dots, x_d) . \quad (\text{A7.1.1})$$

Mit periodischen Randbedingungen sind ebene Elektronenwellen der Form

$$\Psi_k(x_1, x_2, \dots, x_d) = \prod_{j=1}^d e^{ik_j x_j} \quad \text{mit} \quad k_j = \frac{2\pi}{L} n_j \quad (\text{A7.1.2})$$

Lösungen der Schrödinger-Gleichung. Sei nun N_d die Anzahl der Zustände mit $\epsilon \leq \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$. Wir können N_d mit Hilfe der Zustandsdichte $Z_d(k)$ im k -Raum ausdrücken durch

$$N_d = 2Z_d(k) V_d = 2 \left(\frac{L}{2\pi} \right)^d V_d . \quad (\text{A7.1.3})$$

Hierbei wurden zwei Spin-Zustände berücksichtigt.

Wir wollen im Folgenden das Volumen V_d der d -dimensionalen Hypersphäre berechnen. Allgemein korrespondiert eine d -dimensionale Hypersphäre mit einem Satz von Punkten, so dass

$$x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_d^2 \leq R^2 . \quad (\text{A7.1.4})$$

Das Volumen dieser Hypersphäre ist gegeben durch die Integration des infinitesimalen Volumenelement $dV = dx_1 dx_2 \dots dx_d$

$$V_d = \int \dots \int_{x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_d^2 \leq R^2} dx_1 dx_2 \dots dx_d = C_d R^d . \quad (\text{A7.1.5})$$

Andererseits kann das Volumen mittels infinitesimal dünnen, kugelförmigen Schalen mit Radius $0 \leq r \leq R$ aufgebaut werden

$$V_d = \int_0^R S_{d-1}(r) dr . \quad (\text{A7.1.6})$$

Somit ist

$$S_{d-1}(R) = \frac{dV_d(R)}{dR} = d C_d R^{d-1} . \quad (\text{A7.1.7})$$

Zur Berechnung von C_d betrachten wir zunächst die Funktion $f(x_1, x_2, \dots, x_d) = e^{-(x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_d^2)} = e^{-r^2}$. Die Integration über den vollständigen d -dimensionalen Raum ergibt

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_d^2)} dx_1 dx_2 \dots dx_d = \int_0^{+\infty} r^{d-1} e^{-r^2} dr \int d\Omega_{d-1} , \quad (\text{A7.1.8})$$

wobei sphärische Koordinaten $dx_1 dx_2 \dots dx_d = r^{d-1} dr d\Omega_{d-1}$ verwendet wurden. Hierbei beinhaltet $d\Omega_{d-1}$ alle winkelabhängigen Faktoren: $d\Omega_d = d\theta_1 \sin \theta_2 d\theta_2 \sin^2 \theta_3 \dots$. Mit der Definition der Gamma-Funktion $\Gamma(z)$:

$$\Gamma(z) = \int_0^{+\infty} t^{z-1} e^{-t} dt \stackrel{t=r^2}{=} 2 \int_0^{+\infty} r^{2z-1} e^{-r^2} dr \quad (\text{A7.1.9})$$

und den Eigenschaften von $\Gamma(z)$

$$\begin{aligned} \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) &= \sqrt{\pi} \\ \Gamma(z+1) &= z\Gamma(z) \\ \Gamma(1) &= 1 \end{aligned} \quad (\text{A7.1.10})$$

erhalten wir

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} dx = 2 \int_0^{+\infty} e^{-x^2} dx = \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi} , \quad (\text{A7.1.11})$$

und

$$\int_0^{+\infty} r^{d-1} e^{-r^2} dr = \frac{1}{2} \Gamma\left(\frac{d}{2}\right) . \quad (\text{A7.1.12})$$

Gleichung (A7.1.8) ergibt somit

$$\pi^{d/2} = \frac{1}{2} \Gamma\left(\frac{d}{2}\right) \int d\Omega_{d-1} . \quad (\text{A7.1.13})$$

Betrachten wir die Gleichungen (A7.1.5) und (A7.1.6)

$$\int \dots \int_{x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_d^2 \leq R^2} dx_1 dx_2 \dots dx_d = \int_0^R r^{d-1} dr \int d\Omega_{d-1} = d C_d \int_0^R r^{d-1} dr , \quad (\text{A7.1.14})$$

so erkennen wir mittels sphärischen Koordinaten, dass

$$\int d\Omega_{d-1} = d C_d . \quad (\text{A7.1.15})$$

Somit ist

$$C_d = \frac{\pi^{d/2}}{\Gamma\left(1 + \frac{d}{2}\right)} \quad (\text{A7.1.16})$$

und

$$S_{d-1} = \frac{d\pi^{d/2}R^{d-1}}{\Gamma\left(1 + \frac{d}{2}\right)} \text{ bzw. } V_d = \frac{\pi^{d/2}R^d}{\Gamma\left(1 + \frac{d}{2}\right)}. \quad (\text{A7.1.17})$$

Es kann gezeigt werden, dass Gleichung (A7.1.17) nicht von der Wahl der Ausgangsfunktion abhängt und somit allgemein gültig ist.

Werten wir $\Gamma(z)$ für $z = d/2 + 1$ aus, so finden wir $\Gamma(3/2) = \sqrt{\pi}/2$, $\Gamma(4/2) = 2$, $\Gamma(5/2) = 3\sqrt{\pi}/4$ usw.. Die damit erhaltenen Werte für das Volumen V_d und die Oberfläche S_d der d -dimensionalen Einheitskugel ($R = 1$) sind für die Dimensionen $d = 1, \dots, 4$ gegeben durch:

d	S_d	V_d
1	2	2
2	2π	π
3	4π	$4\pi/3$
4	$2\pi^2$	$\pi^2/2$

Der allgemeine Verlauf von V_d und S_d als Funktion der Dimensionalität ist in Abb. 7.1 dargestellt.

Mit Hilfe von (A7.1.17) ergibt der Ausdruck (A7.1.3) für N_d unter Benutzung des Volumens $(L/2\pi)^d$ im k -Raum

$$N_d = 2 \left(\frac{L}{2\pi} \right)^d V_d = 2 \left(\frac{L}{2\pi} \right)^d \frac{\pi^{d/2} k^d}{\Gamma\left(1 + \frac{d}{2}\right)} . \quad (\text{A7.1.18})$$

Nehmen wir eine parabolische Dispersion $\epsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ an, können wir Gleichung (A7.1.18) umschreiben in

$$N_d = 2 \left(\frac{L}{2\pi} \right)^d \frac{\pi^{d/2}}{\Gamma\left(1 + \frac{d}{2}\right)} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{d/2} \epsilon^{d/2} . \quad (\text{A7.1.19})$$

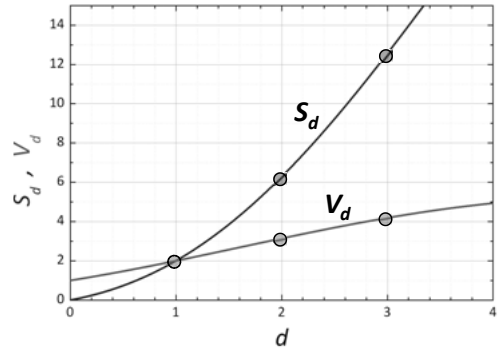


Abb. 7.1: Allgemeiner Verlauf von S_d und V_d als Funktion der Dimensionalität d .

Die Zustandsdichte im Energieraum ist definiert als die Anzahl der Zustände pro Energieintervall und gegeben durch

$$D_d(\epsilon) = \frac{dN_d}{d\epsilon} = d \left(\frac{L}{2\pi} \right)^d \frac{\pi^{d/2}}{\Gamma(1 + \frac{d}{2})} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{d/2} \epsilon^{(d/2)-1} . \quad (\text{A7.1.20})$$

Beispiele für $D_d(\epsilon)/L^d$ sind in Tabelle 7.1 zusammengefasst.

Tabelle 7.1: Zustandsdichte $D_d(\epsilon)/L^d$ für zwei Spin-Projektionen in d Dimensionen.

Dimension d	$D_d(\epsilon)/L^d$
1	$\frac{m}{\pi\hbar} \frac{1}{\sqrt{2m\epsilon}}$
2	$\frac{m}{\pi\hbar^2}$
3	$\frac{m}{\pi^2\hbar^3} \sqrt{2m\epsilon}$

Den Ausdruck für die Fermi-Energie in d -Dimensionen können wir aus der Tatsache ableiten, dass die Fermi-Energie ϵ_F bei $T = 0$ K die besetzten Zuständen ($\epsilon \leq \epsilon_F$) von den unbesetzten ($\epsilon > \epsilon_F$) trennt. Die Fermi-Energie kann deshalb aus der Gesamtanzahl der Teilchen $N = N_{d,F}$ berechnet werden:

$$N = \int_0^{\epsilon_F} D_d(\epsilon) d\epsilon = 2 \left(\frac{L}{2\pi} \right)^d \frac{\pi^{d/2}}{\Gamma(1 + \frac{d}{2})} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{d/2} \epsilon_F^{d/2} . \quad (\text{A7.1.21})$$

Somit ergibt sich

$$\epsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} 4\pi \left(\frac{1}{2} \Gamma\left(1 + \frac{d}{2}\right) n_d \right)^{2/d} \quad (\text{A7.1.22})$$

mit der Teilchendichte $n = N/L^d$. Die besetzten Zustände füllen dabei eine Hypersphäre mit Radius k_F aus:

$$k_F = \sqrt{4\pi} \left(\frac{1}{2} \Gamma\left(1 + \frac{d}{2}\right) n \right)^{1/d} \quad (\text{A7.1.23})$$

Die Fermi-Geschwindigkeit v_F ergibt sich zu

$$v_F = \frac{\hbar k_F}{m} = \sqrt{\frac{4\pi\hbar^2}{m^2}} \left(\frac{1}{2} \Gamma\left(1 + \frac{d}{2}\right) n \right)^{1/d}. \quad (\text{A7.1.24})$$

A7.2 Fermi-Gas mit linearer Dispersion



Wir betrachten ein Elektronengas, das bei der Fermi-Energie ϵ_F eine lineare Dispersion $\epsilon(k) = \hbar k v_F$ besitzt (dies trifft zum Beispiel auf Graphen zu). Berechnen Sie die Zustandsdichte an der Fermi-Kante $D_d(E_F)$ für beide Spin-Richtungen für die Dimensionen $d = 1, 2$ und 3 und vergleichen Sie das Ergebnis mit demjenigen, das für ein Fermi-Gas mit parabolischer Dispersion $\epsilon(k) = \hbar^2 k^2 / 2m$ erhaltenen wird.

Lösung

Mittels Gleichung (A7.1.18) von Aufgabe A7.1 können wir die Zustandsdichte im Energie-raum für eine lineare Dispersion $\epsilon(k) = \hbar k v_F$ direkt berechnen:

$$N_d = 2 \left(\frac{L}{2\pi} \right)^d \frac{\pi^{d/2}}{\Gamma\left(1 + \frac{d}{2}\right)} \left(\frac{\epsilon}{\hbar v_F} \right)^d$$

$$D_d(\epsilon) = \frac{dN_d}{d\epsilon} = 2d \left(\frac{L}{2\pi} \right)^d \frac{\pi^{d/2}}{\Gamma\left(1 + \frac{d}{2}\right)} \left(\frac{1}{\hbar v_F} \right)^d \epsilon^{d-1}. \quad (\text{A7.2.1})$$

Für $d = 1, 2$ und 3 erhalten wir die in Tabelle 7.2 zusammengefassten Beziehungen.

Tabelle 7.2: Zustandsdichte für zwei Spin-Projektionen für ein Fermi-Gas mit linearer und parabolischer Dispersion in d Dimensionen.

d	$D_d(\epsilon_k)$	$D_d(\epsilon_k)$
	lineare Dispersion: $\epsilon_k = \hbar v_F k$	parabolische Dispersion: $\epsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$
1	$\frac{2L}{\pi} \frac{1}{\hbar v_F} \epsilon_k^0$	$\frac{L}{\pi} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{1/2} \epsilon_k^{-1/2}$
2	$\frac{L^2}{\pi} \frac{1}{(\hbar v_F)^2} \epsilon_k^1$	$\frac{L^2}{2\pi} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right) \epsilon_k^0$
3	$\frac{L^3}{\pi^2} \frac{1}{(\hbar v_F)^3} \epsilon_k^2$	$\frac{L^3}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \epsilon_k^{1/2}$

In Abbildung 7.2 ist der Verlauf der Zustandsdichte für $d = 1, 2$ und 3 als Funktion der Energie für eine parabolische und eine lineare Dispersion zum Vergleich graphisch dargestellt. Wir sehen, dass sich die für die lineare Dispersionsrelation erhaltenen Zustandsdichten deutlich von denjenigen unterscheiden, die für eine parabolische Dispersion vorliegen. Insbesondere erhalten wir bei linearer Dispersion für den eindimensionalen Fall eine konstante

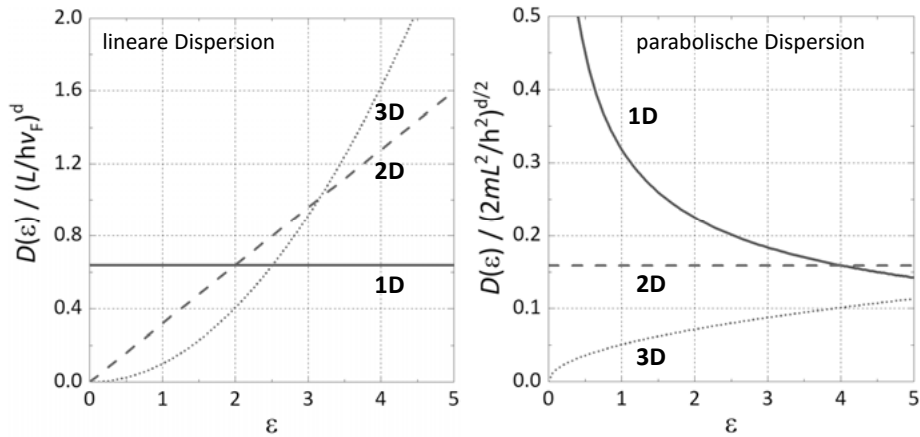


Abb. 7.2: Zustandsdichte für ein 1D-, 2D- und 3D-Elektronengas mit linearer und parabolischer Dispersion.

Zustandsdichte, während wir dies bei parabolischer Dispersion für den zweidimensionalen Fall vorliegen haben.

Für den dreidimensionalen Fall haben wir die Zustandsdichte bei linearer Dispersion bereits im Zusammenhang mit der Zustandsdichte der Phononen im Debye-Modell diskutiert [$D(\omega) \propto \omega^2$, vergleiche hierzu (A6.2.11) in Aufgabe A6.2], wo wir die Dispersionsrelation der akustischen Phononen mit einem linearen Verlauf angenähert haben.



A7.3 Chemisches Potenzial in zwei Dimensionen

Zeigen Sie, dass das chemische Potential eines Fermi-Gases in zwei Dimensionen gegeben ist durch

$$\mu(T) = k_B T \ln \left[\exp \left(\frac{\pi n_{2D} \hbar^2}{m k_B T} \right) - 1 \right],$$

wobei n_{2D} die Anzahl der Elektronen pro Flächeneinheit ist. Beachten Sie, dass die Zustandsdichte pro Flächeneinheit eines zweidimensionalen Elektronengases mit parabolischer Dispersion nicht von der Energie abhängt ($N_{2D}(\epsilon) = D_{2D}(\epsilon)/A = m/\pi\hbar^2 = \text{const.}$).

Lösung

Mit dem allgemeinen Resultat (A7.1.20) von Aufgabe A7.1 können wir für den Fall $d = 2$ schreiben:

$$n_{2D} = \frac{1}{L^2} \sum_{\mathbf{k}\sigma} f_{\mathbf{k}} = \int_0^\infty d\epsilon_{\mathbf{k}} \underbrace{N_{2D}(\epsilon_{\mathbf{k}})}_{m/\pi\hbar^2} f_{\mathbf{k}} = \frac{m}{\pi\hbar^2} \int_0^\infty \frac{d\epsilon_{\mathbf{k}}}{e^{\frac{\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu(T)}{k_B T}} + 1}. \quad (\text{A7.3.1})$$

Hierbei ist $f_k = \left[e^{\frac{\epsilon_k - \mu(T)}{k_B T}} + 1 \right]^{-1}$ die Besetzungswahrscheinlichkeit der Zustände bei der Temperatur T . Dieses Integral ist tabelliert und wir finden

$$\int_0^\infty \frac{dx}{b + ce^{ax}} = \frac{1}{ab} [\ln(b+c) - \ln c] . \quad (\text{A7.3.2})$$

In unserem Fall ist $a = 1/k_B T$, $b = 1$ und $c = e^{-\mu/k_B T}$ und wir erhalten

$$n_{2D} = \frac{m}{\pi \hbar^2} [\mu(T) + k_B T \ln(1 + e^{-\mu/k_B T})] . \quad (\text{A7.3.3})$$

Diese Gleichung müssen wir jetzt noch nach μ auflösen. Wir erhalten

$$\begin{aligned} \frac{n_{2D} \pi \hbar^2}{m k_B T} - \frac{\mu(T)}{k_B T} &= \ln(1 + e^{-\mu/k_B T}) \\ e^{-\mu/k_B T} &= \frac{1}{e^{-n_{2D} \pi \hbar^2 / m k_B T} - 1} . \end{aligned} \quad (\text{A7.3.4})$$

und daraus schließlich

$$\mu(T) = k_B T \ln \left(e^{\frac{n_{2D} \pi \hbar^2}{m k_B T}} - 1 \right) . \quad (\text{A7.3.5})$$

Mit Hilfe der Beziehung $N_{F2} \epsilon_{F2} \equiv n_{2D}$ lässt sich dieses Ergebnis noch wie folgt umschreiben¹

$$\begin{aligned} \mu(T) &= k_B T \ln \left(e^{\frac{\epsilon_{F2}}{k_B T}} - 1 \right) = k_B T \ln \left(e^{\frac{\mu(0)}{k_B T}} - 1 \right) = \mu(0) \frac{T}{T_F} \ln \left(e^{\frac{T_F}{T}} - 1 \right) \\ &= \mu(0) \left\{ 1 - \frac{T}{T_F} \left(e^{-\frac{T_F}{T}} + \frac{1}{2} e^{-\frac{2T_F}{T}} + \frac{1}{3} e^{-\frac{3T_F}{T}} + \dots \right) \right\} . \end{aligned} \quad (\text{A7.3.6})$$

Hierbei ist $T_F = \mu(0)/k_B$ die Fermi-Temperatur. Dieses Ergebnis ist in Abb. 7.3 dargestellt.

A7.4 Fermi-Gase in der Astrophysik



Das Modell freier Fermionen wird nicht nur in der Festkörperphysik sondern auch in verschiedenen anderen Gebieten der Physik verwendet. Übertragen Sie das für die Beschreibung des Verhaltens von Elektronen in Metallen entwickelte Modell des freien Elektronengases auf Fermi-Gase in der Astrophysik.

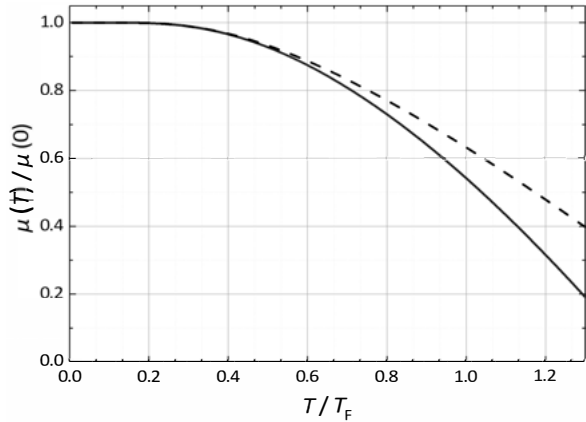
¹ Wir benutzen

$$\mu(0) \frac{T}{T_F} \ln \left(e^{\frac{T_F}{T}} - 1 \right) = \mu(0) \frac{T}{T_F} \ln \left(e^{\frac{T_F}{T}} \left[1 - e^{-\frac{T_F}{T}} \right] \right) = \mu(0) \frac{T}{T_F} \left\{ \frac{T_F}{T} + \ln \left[1 - e^{-\frac{T_F}{T}} \right] \right\} .$$

Mit $\ln(1-z) = -z - z^2/2 - z^3/3 - \dots$ erhalten wir dann

$$\mu(0) \frac{T}{T_F} \ln \left(e^{\frac{T_F}{T}} - 1 \right) = \mu(0) \left\{ 1 - \frac{T}{T_F} \left[e^{-\frac{T_F}{T}} + \frac{1}{2} e^{-\frac{2T_F}{T}} + \frac{1}{3} e^{-\frac{3T_F}{T}} + \dots \right] \right\} .$$

Abb. 7.3: Temperaturabhängigkeit des normierten chemischen Potentials $\mu(T)/\mu(0)$ nach (A7.3.5) für ein zweidimensionales System freier Fermionen. Die gestrichelte Kurve ist die führende Korrektur zum Tieftemperaturlimites $\propto 1 - \frac{T}{T_F} \exp(-T_F/T)$ nach (A7.3.6).



- Gegeben ist die Masse $M_\odot = 1.99 \times 10^{30}$ kg und der Radius $R_\odot = 6.96 \times 10^8$ m unserer Sonne. Schätzen Sie die Zahl der Elektronen in der Sonne ab.
- In etwa 5 Milliarden Jahren wird der Wasserstoffvorrat unserer Sonne aufgebraucht sein und die Sonne geht nach einem Zwischenstadium als Roter Riese, dessen Radius mit dem Bahnradius der Erde vergleichbar ist, in einen Weißen Zwerg ($M \approx 0.5 \cdot M_\odot$, $R_\odot \approx 10^7$ m) über. Da Weiße Zwerge eine Temperatur von etwa 10^7 K besitzen, sind die Heliumatome vollständig ionisiert und die Elektronen können näherungsweise als freie Elektronen betrachtet werden. Berechnen Sie die Fermi-Energie und die Fermi-Temperatur des Elektronengases. Handelt es sich dabei um ein entartetes Elektronengas?
- Die Energie eines Elektrons im relativistischen Grenzfall $\epsilon \gg mc^2$ hängt mit der Wellenzahl k über $\epsilon \approx pc = \hbar kc$ zusammen. Zeigen Sie, dass die Fermi-Energie in diesem Grenzfall ungefähr $\epsilon_F \approx \hbar c (3\pi^2 n)^{1/3}$ beträgt. Hierbei ist n die Elektronendichte und c die Lichtgeschwindigkeit.
- Der Druck des Elektronengases im Inneren eines Weißen Zwerges kann die auf dem Weißen Zwerg lastende Gravitationskraft nur dann kompensieren, wenn dieser eine Masse von weniger als 1.4 Sonnenmassen hat. Besitzt eine ausgebrannte Sonne eine höhere Masse, so wird sich der sterbende Stern stattdessen in einen Neutronenstern mit einem Radius von etwa 15 km umwandeln. Berechnen Sie die Fermi-Energie eines Neutronensterns mit der Masse $M = 1.5 \cdot M_\odot$.
- Man glaubt, dass Pulsare eher aus Neutronen als aus Protonen und Elektronen bestehen. Dies liegt daran, dass der Energiegewinn der Reaktion $n \rightarrow p^+ + e^- + \bar{\nu}_e$ nur 0.77×10^6 eV beträgt. Überlegen Sie, bei welcher Elektronenkonzentration die Fermi-Energie des Elektronengases größer als dieser Wert wird. Wird der Zerfall der Neutronen dann noch fortschreiten?

Lösung

- Wir können für eine grobe Abschätzung annehmen, dass die Sonne nur aus Wasserstoff besteht. Die Anzahl der Elektronen N ist dann gleich der Anzahl der Nukleonen in der Sonne. Diese erhalten wir, indem wir die Masse der Sonne durch die atomare Massen-

einheit teilen. Wir erhalten somit

$$N \simeq \frac{1.99 \times 10^{30} \text{ kg}}{1.67 \times 10^{-27} \text{ kg}} = 1.19 \times 10^{57}. \quad (\text{A7.4.1})$$

- (b) Ein weißer Zwerg mit Radius $R_\odot \simeq 10^7 \text{ m}$ hat ein Volumen $V = \frac{4\pi}{3} (10^7 \text{ m})^3 = 4.2 \times 10^{21} \text{ m}^3$. Mit der Masse $M \simeq 0.5 \cdot M_\odot$ enthält der Weiße Zwerg in seinem Innern $N_{\text{He}} = M/m_{\text{He}} = 0.5 \cdot M_\odot/4u \simeq 1.50 \times 10^{56}$ Heliumatome. Da diese vollständig ionisiert sind, also zwei Elektronen liefern, ist die Elektronendichte

$$n = \frac{2N_{\text{He}}}{V} \simeq \frac{3.0 \times 10^{56}}{4.2 \times 10^{21} \text{ m}^3} = 7.14 \times 10^{34} \text{ m}^{-3}. \quad (\text{A7.4.2})$$

Da die Fermi-Wellenzahl k_F und die Fermi-Energie ϵ_F nur von der Dichte der Fermionen abhängen, können wir diese sofort zu

$$k_F = (3\pi^2 n)^{1/3} = 1.28 \times 10^{12} \text{ m}^{-1} \quad (\text{A7.4.3})$$

$$\begin{aligned} \epsilon_F &= \frac{\hbar^2}{2m_e} (3\pi^2 n)^{2/3} = 6.05 \times 10^{-39} \cdot 1.64 \times 10^{24} \text{ J} = 9.9 \times 10^{-15} \text{ J} \\ &= 6.19 \times 10^4 \text{ eV} \end{aligned} \quad (\text{A7.4.4})$$

angeben, wobei wir $\hbar = 1.054 \times 10^{-34} \text{ Js}$ und die Ruhemasse des Elektrons $m_e = 9.109 \times 10^{-31} \text{ kg}$ verwendet haben. Der Wert der Fermi-Energie liegt noch weit unterhalb der Ruheenergie $m_e c^2 = 511 \text{ keV}$ der Elektronen, was die Verwendung des nicht-relativistischen Ausdrucks $\epsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3}$ für die Fermi-Energie rechtfertigt. Die Fermi-Temperatur $T_F = \epsilon_F/k_B$ beträgt $7.17 \times 10^8 \text{ K}$ und übertrifft die Temperatur von etwa 10^7 K im Sterninnern deutlich. Das heißt, dass Weiße Zwerge ein nicht-relativistisch zu behandelndes entartetes Elektronengas besitzen, dessen Fermi-Druck mit der Gravitationskraft, welche auf den Teilchen lastet, im Gleichgewicht steht.

- (c) Die Fermi-Wellenzahl k_F selbst ändert sich nicht beim Übergang vom nicht-relativistischen zum relativistischen Grenzfall. Wir müssen aber die relativistische Beziehung zwischen der kinetischen Energie und der Wellenzahl k eines Teilchens mit der Ruhemasse m_0 und dem Impuls $p = \hbar k$ verwenden. Diese lautet

$$\epsilon(k) = \sqrt{(\hbar k c)^2 + (m_0 c^2)^2} - m_0 c^2. \quad (\text{A7.4.5})$$

Daraus lässt sich die Fermi-Energie $\epsilon_F = \epsilon(k_F)$ eines relativistischen Fermionengases durch Einsetzen der Fermi-Wellenzahl $k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}$ berechnen.

Im klassischen Grenzfall $\epsilon \ll m_0 c^2$ können wir den obigen Ausdruck für $\epsilon(k)$ entwickeln und wir erhalten den genäherten Ausdruck

$$\epsilon(k) = m_0 c^2 \underbrace{\sqrt{1 + \frac{(\hbar k c)^2}{(m_0 c^2)^2}}}_{\simeq 1 + \frac{1}{2} \frac{(\hbar k c)^2}{(m_0 c^2)^2}} - m_0 c^2 \simeq \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \quad (\text{A7.4.6})$$

und damit den bekannten nicht-relativistischen Ausdruck

$$\epsilon_F \simeq \frac{\hbar^2}{2m_0} (3\pi^2 n)^{2/3} \quad (\text{A7.4.7})$$

für die Fermi-Energie.

Im extrem relativistischen Grenzfall $\epsilon \gg m_0 c^2$ kann die Ruheenergie des Teilchens vernachlässigt werden, woraus sich

$$\epsilon(k) \simeq \hbar k c \quad (\text{A7.4.8})$$

ergibt. Mit $k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}$ erhalten wir dann die Fermi-Energie

$$\epsilon_F \simeq \hbar c (3\pi^2 n)^{1/3}. \quad (\text{A7.4.9})$$

Wir sehen, dass die Energie-Wellenzahl-Beziehung im nicht-relativistischen Bereich einen quadratischen, im relativistischen Bereich dagegen einen linearen Verlauf besitzt.

Anmerkung: Die Dispersionsrelation von Graphen verläuft für Wellenvektoren in der Nähe der sechs Ecken der zweidimensionalen hexagonalen Brillouin-Zone (dies entspricht Energien nahe an der Fermi-Energie) linear. Die Elektronen und Löcher in der Nähe dieser Punkte verhalten sich deshalb wie relativistische Teilchen, die durch die Dirac-Gleichung für Spin-1/2 Teilchen (Fermionen) beschrieben werden. Wir bezeichnen diese Teilchen deshalb als Dirac-Fermionen und die sechs Punkte in der Brillouin-Zone als Dirac-Punkte. Die Dispersionsrelation in der Nähe der Dirac-Punkte lautet $\xi_k = \hbar v_F k$, wobei $v_F = 106 \text{ m/s}$ und $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ vom jeweiligen Dirac-Punkt aus gemessen wird (der Nullpunkt der Energieskala wird in den Dirac-Punkt gelegt).

- (d) Ein Neutronenstern der Masse $M = 1.5 \cdot M_\odot$ besteht aus insgesamt $N = M/m_n = 1.5 \cdot M_\odot/m_n = 1.78 \times 10^{57}$ Neutronen ($m_n = 1.674 \times 10^{-27} \text{ kg}$). Bei einem Radius von 15 km berechnet sich daraus die Neutronendichte zu $n = 1.26 \times 10^{44} \text{ m}^{-3}$. Diese Dichte entspricht etwa der Nukleonendichte in Atomkernen. Im Gegensatz zu Atomkernen wird der Zusammenhalt von Neutronensternen aber nicht durch die starke Wechselwirkung gewährleistet, sondern durch die Gravitationskraft. Die Fermi-Wellenzahl $k_F = (3\pi^2 n)^{1/3} = 1.55 \times 10^{15} \text{ m}^{-1}$ der Neutronen liefert unter der Annahme einer nicht-relativistischen $\epsilon(k)$ Beziehung für Teilchen der Ruhemassen $m_0 = m_n$ eine Fermi-Energie von

$$\epsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m_n} = 7.98 \times 10^{-12} \text{ J} \simeq 50 \text{ MeV}. \quad (\text{A7.4.10})$$

Diese Energie liegt erheblich unter der Ruheenergie $m_n c^2 = 941 \text{ MeV}$ von Neutronen. Die entsprechende Fermi-Temperatur $T_F = \epsilon_F/k_B$ beträgt $T_F = 5.79 \times 10^{11} \text{ K}$. Diese Temperatur wird von Neutronensternen bei weitem nicht erreicht. Das Fermi-Gas eines Neutronensterns stellt deshalb ein stark entartetes Quantengas dar.

- (e) Bei einer vollständigen Umwandlung des Neutronensterns in Protonen und Elektronen würde jedes Neutron ein Elektron erzeugen. Die Elektronendichte würde also der in der vorangegangenen Teilaufgabe berechneten Neutronendichte entsprechen, was in einer Fermi-Wellenzahl der Elektronen von $k_F = (3\pi^2 n)^{1/3} = 1.55 \times 10^{15} \text{ m}^{-1}$ resultie-

ren würde. Würden wir wiederum die Fermi-Energie in nicht-relativistischer Näherung berechnen, so würden wir einen Wert erhalten, der weit oberhalb der Ruheenergie der Elektronen liegen würde. Wir müssen also die relativistische Näherung verwenden. In dieser erhalten wir

$$\epsilon_F = \hbar k_F c = 306 \text{ MeV} . \quad (\text{A7.4.11})$$

Da beim Zerfall des Neutrons nur eine Energie von 0.77 MeV frei wird, muss davon ausgegangen werden, dass Neutronensterne nur zu einem unbedeutend geringen Anteil Protonen und Elektronen enthalten. Der Zerfall von Neutronen in Protonen und Elektronen wird nämlich nur so lange fortgesetzt, bis die Fermi-Energie der Elektronen etwa die Zerfallsenergie erreicht. Nach der relativistischen $\epsilon(k)$ Beziehung ist dies bei $k_F \simeq 6 \times 10^{12} \text{ m}^{-1}$ der Fall. Wegen $N \propto k_F^3$ können wir das Verhältnis von Elektronen und Neutronen in einem Neutronenstern zu

$$\frac{N_e}{N_n} = \frac{k_{F,e}^3}{k_{F,n}^3} \simeq 5 \times 10^{-8} \quad (\text{A7.4.12})$$

angeben.

Der Nachweis dafür, dass Neutronensterne wirklich existieren, wurde 1967 mit der Entdeckung von Pulsaren erbracht. Bei Pulsaren handelt es sich um rasch rotierende Neutronensterne, welche in Folge eines im Sterninnern verankerten Magnetfeldes von bis zu 10^8 Tesla in regelmäßiger Folge kurze Strahlungsimpulse aussenden. Die Periodendauer dieser Signale liegt dabei typischerweise im Bereich zwischen 0.03 und 3 s.

A7.5 Flüssiges ^3He als Fermi-Gas



^3He besitzt einen Kernspin $I = 1/2$ und ist deshalb ein Fermion. Aufgrund der durch die kleine Atommasse verursachten großen Nullpunktsfluktuationen wird ^3He selbst bei $T = 0 \text{ K}$ nicht fest. Es bildet deshalb eine Fermi-Flüssigkeit mit einer Dichte von $\rho = 0.08 \text{ g/cm}^3$.

- Bestimmen Sie die Fermi-Energie ϵ_F , Fermi-Temperatur T_F und die Fermi-Geschwindigkeit v_F . Vergleichen Sie diese Werte mit denjenigen, die typischerweise für Elektronengase in Metallen erhalten werden. Wieso stellt flüssiges ^3He ein ideales Modellsystem für das Studium von Fermi-Gasen dar, welche Vorteile bestehen gegenüber Elektronengasen in Metallen?
- Berechnen Sie die spezifische Wärme von flüssigem ^3He für $T \ll T_F$. Berücksichtigen Sie dabei die Tatsache, dass die effektive Masse der ^3He -Atome in der Flüssigkeit etwa 2.8-mal so groß ist wie diejenige der freien Atome. Vergleichen Sie den für $T = 20 \text{ mK}$ erhaltenen Wert mit dem von Kupfer.

Lösung

Wir betrachten ^3He vereinfachend als nichtwechselwirkendes Gas von Fermionen. Die Masse von ^3He -Atomen beträgt $m_{^3\text{He}} = 3.0160293 u$ mit der atomaren Masseneinheit $u = 1.660538 \times 10^{-27} \text{ kg}$. Aus der angegebenen Dichte von $\rho = 0.08 \text{ g/cm}^3 = 80 \text{ kg/m}^3$

können wir die Dichte des Fermi-Gases berechnen zu

$$n_{^3\text{He}} = \frac{\rho}{m_{^3\text{He}}} = \frac{80}{3.016 \cdot 1.660 \times 10^{-27}} \text{ m}^{-3} = 1.598 \times 10^{28} \text{ m}^{-3}. \quad (\text{A7.5.1})$$

Zur weiteren Lösung der Aufgabe verwenden wir ferner die reduzierte Planck-Konstante $\hbar = 1.054 \times 10^{-34} \text{ Js}$, die Boltzmann-Konstante $k_B = 1.380 \times 10^{-23} \text{ J/K}$ und die Elektronenmasse $m_e = 9.109 \times 10^{-31} \text{ kg}$.

(a) Da wir ^3He als ideales Fermi-Gas betrachten, ist die Fermi-Energie gegeben durch

$$\epsilon_F = \mu(0) = \frac{\hbar^2}{2m_{^3\text{He}}} (3\pi^2 n_{^3\text{He}})^{2/3} = 6.736 \times 10^{-23} \text{ J} = 0.421 \text{ meV}. \quad (\text{A7.5.2})$$

Für die Fermi-Temperatur und die Fermi-Geschwindigkeit ergeben sich

$$T_F = \frac{\epsilon_F}{k_B} = 4.8814 \text{ K} \quad (\text{A7.5.3})$$

$$v_F = \sqrt{2\epsilon_F/m_{^3\text{He}}} = 164.0 \text{ m/s}. \quad (\text{A7.5.4})$$

Durch die endliche Wechselwirkung der Atome stellt flüssiges ^3He kein ideales Fermi-Gas sondern eine Fermi-Flüssigkeit mit einer effektiven Masse $m^* = 2.8m_{^3\text{He}}$ dar. Dadurch ergeben sich die modifizierten Werte

$$\epsilon_F^* = \frac{\epsilon_F}{2.8} = 2.405 \times 10^{-23} \text{ J} = 0.150 \text{ meV} \quad (\text{A7.5.5})$$

$$T_F^* = \frac{T_F}{2.8} = 1.743 \text{ K} \quad (\text{A7.5.6})$$

$$v_F^* = \frac{v_F}{2.8} = 58.5 \text{ m/s}. \quad (\text{A7.5.7})$$

Die Fermi-Energie, -Temperatur und -Geschwindigkeit werden durch die Dichte n der Fermionen und deren Masse m bestimmt. Während die Atomdichte in flüssigem ^3He die gleiche Größenordnung wie die Elektronendichte in Metallen hat (die Elektronendichte in Kupfer beträgt z. B. $n_e = 8.45 \times 10^{28} \text{ m}^{-3}$), ist die Masse der ^3He -Atome um mehr als drei Größenordnungen höher als die Elektronenmasse. Da die Fermi-Energie und -Temperatur proportional zu $1/m$ skalieren, besitzt flüssiges ^3He eine im Vergleich zu einem Elektronengas viel niedrigere Fermi-Energie (Fermi-Temperatur). Während wir für Metalle Fermi-Energien (-Temperaturen) im Bereich einiger eV (10 000 K) haben, beträgt diese für ^3He weniger als 1 meV (10 K). Dies bietet große Vorteile beim Studium von Fermi-Gasen bzw. Fermi-Flüssigkeiten. Da die Fermi-Temperatur von Elektronengasen weit oberhalb der Schmelztemperatur von Metallen liegt, kann der Übergang von einem entarteten Quantengas bei $T < T_F$ zu einem klassischen Teilchengas bei $T > T_F$ mit Metallen prinzipiell nicht studiert werden. Für flüssiges ^3He mit $T_F^* \approx 1.7 \text{ K}$ ist dies dagegen leicht möglich. Der entsprechende Temperaturbereich ist mit etablierten Kühlt-techniken leicht zu erreichen. Zusätzlich kann ^3He sehr rein hergestellt werden.

(b) Um die spezifische Wärme von flüssigem ^3He für $T \ll T_F$ zu berechnen, benutzen wir die Tieftemperaturnäherung der spezifischen Wärme eines idealen Fermi-Gases:

$$c_V = \frac{C_V}{V} = \frac{\pi^2}{2} n_{^3\text{He}} k_B \frac{T}{T_F^*}. \quad (\text{A7.5.8})$$

Um die endlichen Wechselwirkungseffekte zu berücksichtigen, verwenden wir die effektive Fermi-Temperatur $T_F^* = 1.743 \text{ K}$. Damit erhalten wir für $T = 20 \text{ mK}$

$$\begin{aligned} c_V(20 \text{ mK}) &= 4.935 \cdot 1.598 \times 10^{28} \cdot 1.38 \times 10^{-23} \cdot \frac{0.02}{1.743} \frac{\text{J}}{\text{m}^3 \text{K}} \\ &= 1.249 \times 10^4 \frac{\text{J}}{\text{m}^3 \text{K}}. \end{aligned} \quad (\text{A7.5.9})$$

Wir vergleichen diesen Wert nun mit der elektronischen spezifischen Wärme von Kupfer, die wir mit der gleichen Formel berechnen können. Für die Fermi-Temperatur von Kupfer erhalten wir mit der Elektronendichte $n_e = 8.45 \times 10^{28} \text{ m}^{-3}$

$$T_F = \frac{\hbar^2}{2m_e k_B} (3\pi^2 n_e)^{2/3} = 8.14 \times 10^4 \text{ K}. \quad (\text{A7.5.10})$$

Mit diesem Wert ergibt sich die spezifische Wärme von Kupfer zu

$$\begin{aligned} c_V(20 \text{ mK}) &= 4.935 \cdot 8.45 \times 10^{28} \cdot 1.38 \times 10^{-23} \cdot \frac{0.02}{8.14 \times 10^4} \frac{\text{J}}{\text{m}^3 \text{K}} \\ &= 1.413 \frac{\text{J}}{\text{m}^3 \text{K}}. \end{aligned} \quad (\text{A7.5.11})$$

Wir sehen, dass dieser Wert um etwa 4 Größenordnungen kleiner ist als derjenige von flüssigem ^3He . Ursache dafür ist wiederum die wesentlich kleinere Fermi-Temperatur.

A7.6 Mittlere Energie, Druck und Kompressibilität eines zweidimensionalen Fermi-Gases



Wir betrachten ein zweidimensionales Gas freier Elektronen.

- Berechnen Sie die mittlere Energie $\langle E \rangle = U/N$ eines Elektrons bei $T = 0 \text{ K}$.
- Aus der inneren Energie $U(S, A, N)$ eines Systems, welche als Funktion der Entropie S , des Volumens V und der Teilchenzahl N gegeben ist, lässt sich durch partielles Ableiten nach dem Volumen der im System herrschende Druck berechnen:

$$p = - \left(\frac{\partial U}{\partial A} \right)_{S, N}.$$

Welchen Fermi-Druck besitzt das zweidimensionale Elektronensystem bei $T = 0 \text{ K}$?

- Bestimmen Sie die isotherme Kompressibilität

$$\kappa_T = - \frac{1}{A} \left(\frac{\partial A}{\partial p} \right)_T.$$

Diese gibt Auskunft über die relative Änderung der Fläche A des zweidimensionalen Systems, welche durch eine infinitesimale Änderung des Druckes bei konstanter Temperatur bewirkt wird.

Lösung

- (a) Wir berechnen zunächst die innere Energie U des gesamten Elektronensystems. Mit der Zustandsdichte $Z_2(k) = \frac{L^2}{(2\pi)^2} = \frac{A}{(2\pi)^2}$ im zweidimensionalen k -Raum erhalten wir

$$\begin{aligned}
 U &= \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} = \frac{A}{(2\pi)^2} \sum_{\sigma} \int d^2k \epsilon_{\mathbf{k}} \\
 &= 2 \frac{A}{(2\pi)^2} \int_0^{k_F} dk 2\pi k \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = 2 \frac{A}{2\pi} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{k_F^4}{4} \\
 &= \frac{A}{4\pi} \frac{\hbar^2}{2m} k_F^4 = \epsilon_F \frac{A k_F^2}{4\pi}.
 \end{aligned} \tag{A7.6.1}$$

Die Größe der Fermi-Wellenzahl können wir aus dem Ausdruck für die Gesamtelektronenzahl N gewinnen. N ist gegeben durch die Fläche des Fermi-Kreises mal der Zustandsdichte mal der Spin-Entartung, also durch (wir benutzen die Heaviside-Funktion Θ)

$$\begin{aligned}
 N &= \sum_{\mathbf{k}\sigma} \Theta(k_F - |\mathbf{k}|) = 2 \cdot \frac{A}{(2\pi)^2} \cdot \int_0^{k_F} dk 2\pi k \\
 &= 2 \frac{A}{2\pi} \frac{k_F^2}{2} = \frac{A}{2\pi} k_F^2 \\
 n_{2D} &= \frac{N}{A} = \frac{k_F^2}{2\pi}.
 \end{aligned} \tag{A7.6.2}$$

Daraus erhalten wir die Fermi-Wellenzahl

$$k_F = \sqrt{2\pi n_{2D}} \tag{A7.6.3}$$

und die Fermi-Energie

$$\epsilon_{F2} = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} 2\pi n_{2D}. \tag{A7.6.4}$$

Mit diesen Ausdrücken können wir die mittlere Energie $\langle E \rangle$ der Elektronen schreiben als

$$\langle E \rangle = \frac{U}{N} = \epsilon_{F2} \frac{A k_F^2}{4\pi} \frac{2\pi}{A k_F^2} = \frac{1}{2} \epsilon_{F2}. \tag{A7.6.5}$$

- (b) Mit der inneren Energie

$$U = \epsilon_{F2} \frac{A k_F^2}{4\pi} = \frac{\hbar^2 \left(2\pi \frac{N}{A}\right)}{2m} \frac{A \left(2\pi \frac{N}{A}\right)}{4\pi} = \pi \frac{\hbar^2}{2m} \frac{N^2}{A} \tag{A7.6.6}$$

erhalten wir für ein zweidimensionales System (der Druck hat hier die Einheit N/m und nicht N/m² wie bei einem dreidimensionalen System)

$$\begin{aligned}
 p &= - \left(\frac{\partial U}{\partial A} \right)_{S,N} \\
 &= \pi \frac{\hbar^2}{2m} \frac{N^2}{A^2} = \frac{1}{2} \underbrace{2\pi \frac{\hbar^2}{2m} n_{2D}}_{=\epsilon_{F2}} n_{2D} = \frac{1}{2} \epsilon_{F2} n_{2D}.
 \end{aligned} \tag{A7.6.7}$$

Da $\frac{1}{2}\epsilon_{F2}n_2$ gerade die Gesamtenergiedichte des zweidimensionalen Elektronengassystems ist, erhalten wir

$$p = - \left(\frac{\partial U}{\partial A} \right)_{S,N} = \frac{U}{A}. \quad (\text{A7.6.8})$$

- (c) Aus der Abhängigkeit $p(A)$ können wir als nächsten Schritt die isotherme Kompressibilität κ_T und das Kompressionsmodul $B = \kappa_T^{-1}$ berechnen:

$$\kappa_T = -\frac{1}{A} \left(\frac{\partial A}{\partial p} \right)_T \equiv \frac{1}{B}. \quad (\text{A7.6.9})$$

Wir erhalten

$$B = -A \frac{\partial}{\partial A} \left[\frac{1}{2} \epsilon_{F2} \frac{N}{A} \right] = -A \left[\frac{1}{2} \frac{\partial \epsilon_{F2}}{\partial A} \frac{N}{A} - \frac{1}{2} \epsilon_{F2} \frac{\partial}{\partial A} \frac{N}{A} \right]. \quad (\text{A7.6.10})$$

Nun ist

$$\frac{\partial \epsilon_{F2}}{\partial A} = \frac{\hbar^2}{2m} 2\pi \frac{\partial}{\partial A} \frac{N}{A} = -\frac{\hbar^2}{2m} 2\pi \frac{N}{A^2} = -\frac{\epsilon_{F2}}{A} \quad (\text{A7.6.11})$$

und wir erhalten

$$\begin{aligned} B &= -A \left[-\frac{1}{2} \epsilon_{F2} \frac{N}{A^2} - \frac{1}{2} \epsilon_{F2} \frac{N}{A^2} \right] \\ &= A \left[\epsilon_{F2} \frac{N}{A^2} \right] = \epsilon_{F2} \frac{N}{A} = \epsilon_{F2} n_{2D} = 2p. \end{aligned} \quad (\text{A7.6.12})$$

Für die isotherme Kompressibilität können wir dann schreiben

$$\kappa_T = \frac{1}{B} = \frac{1}{\epsilon_{F2} n_{2D}} = \frac{1}{2p}. \quad (\text{A7.6.13})$$

A7.7 Frequenzabhängigkeit der elektrischen Leitfähigkeit eines Metalls



Gegeben sei ein Metall mit Volumen V und N Elektronen der Masse m und der Dichte $n = N/V$. Die (technische) elektrische Stromdichte \mathbf{J}_q ist mit der Driftgeschwindigkeit \mathbf{v} von positiven Ladungsträgern über $\mathbf{J}_q = nq\mathbf{v}$ verknüpft. Für Elektronen mit $q = -e$ gilt deshalb $\mathbf{J}_q = -nev$. In Anwesenheit eines elektrischen Feldes $\mathbf{E}(t)$ genügt $\mathbf{v}(t)$ der Relaxationsgleichung

$$m \left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{\tau} \right) \mathbf{v}(t) = -e\mathbf{E}(t)$$

mit der Impulsrelaxationszeit τ .

- (a) Berechnen Sie die zeitabhängige Stromdichte $\mathbf{J}_q(t)$ für den Fall einer harmonischen Zeitabhängigkeit von $\mathbf{E}(t) = \mathbf{E}_0 \exp(-i\omega t)$ und leiten Sie einen Ausdruck für die dynamische Leitfähigkeit $\sigma(\omega) = \delta \mathbf{J}_q / \delta \mathbf{E}$ im Limes $t/\tau \rightarrow \infty$ ab.

- (b) Benutzen Sie das Resultat für $\sigma(\omega)$, um mit Hilfe der Maxwell-Gleichungen die frequenzabhängige dielektrische Funktion $\epsilon(\omega)$ eines Metalls abzuleiten. Hinweis: Gehen Sie hierbei von der Definition (harmonische Zeitabhängigkeit $\partial/\partial t \rightarrow -i\omega$)

$$\epsilon_0 \epsilon(\omega) \mathbf{E} = \epsilon_0 \mathbf{E} + \frac{\mathbf{J}_q}{-i\omega}$$

aus.

- (c) Berechnen Sie die frequenzabhängige elektromagnetische Eindringtiefe (Skin-Tiefe) $\delta(\omega)$ für die elektrische (\mathbf{E}) und magnetische (\mathbf{B}) Feldstärke.
 (d) Wie lautet der Zusammenhang zwischen $\delta(\omega)$ und $\epsilon(\omega)$?

Lösung

Zu Beginn seien an dieser Stelle noch einmal die Maxwell-Gleichungen der Elektrodynamik wiederholt. Sie lauten in SI-Einheiten ($\epsilon = \mu = 1$)

$$\nabla \times \mathbf{H} = \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} + \mathbf{J}_q, \quad \mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E} \quad (\text{A7.7.1})$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H} \quad (\text{A7.7.2})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (\text{A7.7.3})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho_q. \quad (\text{A7.7.4})$$

Für Elektronen mit Ladung $q = -e$ ist die Ladungsträgerdichte $\rho_q = -en = -eN/V$ und die elektrische Stromdichte $\mathbf{J}_q = qn\mathbf{v} = -en\mathbf{v}$. Die Bewegungsrichtung der Elektronen ist also antiparallel zur elektrischen Stromdichte. Die Maxwell-Gleichungen werden ergänzt durch die konstitutive Relation (Ohmsches Gesetz)

$$\mathbf{J}_q = \sigma \cdot \mathbf{E}, \quad (\text{A7.7.5})$$

welche die Stromdichte \mathbf{J}_q mit der elektrischen Feldstärke \mathbf{E} über die elektronische Leitfähigkeit σ verknüpft. Aus Gleichung (A7.7.1) können wir durch Bildung der Divergenz ($\nabla \cdot \dots$) die Kontinuitätsgleichung (vergleiche hierzu Aufgabe A9.1)

$$\frac{\partial \rho_q}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J}_q = 0 \quad (\text{A7.7.6})$$

für die Ladungsdichte ρ_q ableiten.

Bilden wir dagegen die Rotation von Gleichung (A7.7.1) ($\nabla \times \dots$), so erhalten wir

$$\begin{aligned} \nabla \times (\nabla \times \mathbf{H}) &= -\nabla^2 \mathbf{H} + \nabla(\nabla \cdot \mathbf{H}) = -(\nabla^2 - \nabla : \nabla) \mathbf{H} \\ -(\nabla^2 - \nabla : \nabla) \mathbf{H} &= \frac{\partial}{\partial t} \nabla \times \mathbf{D} + \nabla \times \mathbf{J}_q \\ &= \epsilon_0 \frac{\partial}{\partial t} \nabla \times \mathbf{E} + \nabla \times \mathbf{J}_q \\ &\stackrel{(\text{A7.7.2})}{=} -\epsilon_0 \frac{\partial^2 \mathbf{B}}{\partial t^2} + \nabla \times \mathbf{J}_q \\ &= -\mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial^2 \mathbf{H}}{\partial t^2} + \nabla \times \mathbf{J}_q \end{aligned} \quad (\text{A7.7.7})$$

Dies führt mit Hilfe von $\mu_0 \epsilon_0 = 1/c^2$ auf die Gleichung

$$\left[\nabla^2 - \nabla : \nabla - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right] \mathbf{B} = -\mu_0 \nabla \times \mathbf{J}_q, \quad (\text{A7.7.8})$$

die wir, wie wir noch sehen werden, als Abschirmgleichung für das Magnetfeld interpretieren können, aus der die magnetische Abschirmlänge (Skin-Tiefe) berechnet werden kann.

Bilden wir schließlich die Rotation von Gleichung (A7.7.2) ($\nabla \times \dots$) so ergibt sich

$$\begin{aligned} \nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}) &= -\frac{\partial}{\partial t} \nabla \times \mathbf{B} = -\nabla^2 \mathbf{E} + \nabla(\nabla \cdot \mathbf{E}) \\ -(\nabla^2 - \nabla : \nabla) \mathbf{E} &= -\mu_0 \frac{\partial}{\partial t} \nabla \times \mathbf{H} \\ &= -\mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} - \mu_0 \frac{\partial \mathbf{J}_q}{\partial t}. \end{aligned} \quad (\text{A7.7.9})$$

Dies lässt sich zu folgender Gleichung zusammenfassen:

$$\left[\nabla^2 - \nabla : \nabla - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right] \mathbf{E} = \mu_0 \frac{\partial \mathbf{J}_q}{\partial t}. \quad (\text{A7.7.10})$$

- (a) Um die Gleichungen (A7.7.8) und (A7.7.10) weiter behandeln zu können, benötigen wir den Zusammenhang zwischen der Stromdichte \mathbf{J}_q und der elektrischen Feldstärke \mathbf{E} . Hierzu müssen wir die Relaxationsgleichung

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{\tau} \right) \mathbf{v}(t) = q \frac{\mathbf{E}(t)}{m} \quad (\text{A7.7.11})$$

lösen. Für Elektronen mit $\mathbf{J}_q = -ne\mathbf{v}$ und $q = -e$ ergibt sich

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{\tau} \right) \mathbf{J}_q(t) = \frac{ne^2}{m} \mathbf{E}(t) \quad (\text{A7.7.12})$$

Die allgemeine Lösung dieser inhomogenen Differentialgleichung 1. Ordnung lässt sich wie folgt angeben:

$$\mathbf{J}_q(t) = \mathbf{J}_q(0)e^{-\frac{t}{\tau}} + \underbrace{\frac{ne^2}{m} e^{-\frac{t}{\tau}} \int_0^t dt' \mathbf{E}(t') e^{\frac{t'}{\tau}}}_{(*)}. \quad (\text{A7.7.13})$$

Mit der Annahme eines elektrischen Wechselfeldes der Form $\mathbf{E}(t) = \mathbf{E}_0 \exp(-i\omega t)$ können wir den Term $(*)$ auswerten:

$$(*) = \mathbf{E}_0 \int_0^t dt' e^{(-i\omega + \frac{1}{\tau})t'} = \frac{\mathbf{E}_0}{-i\omega + \frac{1}{\tau}} \left[e^{(-i\omega + \frac{1}{\tau})t} - 1 \right]. \quad (\text{A7.7.14})$$

Einsetzen in den Ausdruck für die Stromdichte liefert

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_q(t) &= \mathbf{J}_q(0)e^{-\frac{t}{\tau}} + \frac{ne^2}{m} \frac{\mathbf{E}_0}{-\mathrm{i}\omega + \frac{1}{\tau}} e^{-\frac{t}{\tau}} \left[e^{(-\mathrm{i}\omega + \frac{1}{\tau})t} - 1 \right] \\ &= \left[\mathbf{J}_q(0) - \frac{ne^2}{m(-\mathrm{i}\omega + \frac{1}{\tau})} \mathbf{E}_0 \right] e^{-\frac{t}{\tau}} + \frac{ne^2}{m(-\mathrm{i}\omega + \frac{1}{\tau})} \mathbf{E}(t). \end{aligned} \quad (\text{A7.7.15})$$

In diesem Resultat können wir folgende Größe als frequenzabhängige Leitfähigkeit identifizieren:

$$\sigma(\omega) = \frac{ne^2}{m(-\mathrm{i}\omega + \frac{1}{\tau})} = \frac{ne^2\tau}{m(1 - \mathrm{i}\omega\tau)} = \frac{\sigma_0}{1 - \mathrm{i}\omega\tau}, \quad \sigma_0 = \frac{ne^2\tau}{m}. \quad (\text{A7.7.16})$$

Damit können wir die Stromdichte in der endgültigen Form

$$\mathbf{J}_q(t) = [\mathbf{J}_q(0) - \sigma(\omega)\mathbf{E}_0] e^{-\frac{t}{\tau}} + \sigma(\omega)\mathbf{E}(t) \stackrel{t \gg \tau}{\approx} \sigma(\omega)\mathbf{E}(t) \quad (\text{A7.7.17})$$

schreiben. Der Real- und Imaginärteil der komplexen Leitfähigkeit

$$\begin{aligned} \sigma_r &= \frac{\sigma_0}{1 + \omega^2\tau^2} \\ \sigma_i &= \frac{\sigma_0\omega\tau}{1 + \omega^2\tau^2} \end{aligned} \quad (\text{A7.7.18})$$

sind in Abb. 7.4 dargestellt.

- (b) Mit dem Resultat (A7.7.17) können wir nun die dielektrische Funktion des Elektronensystems ableiten. Wir können nämlich definieren:

$$\epsilon_0\mathbf{E} + \frac{\mathbf{J}_q}{-\mathrm{i}\omega} \equiv \epsilon_0\epsilon(\omega)\mathbf{E}. \quad (\text{A7.7.19})$$

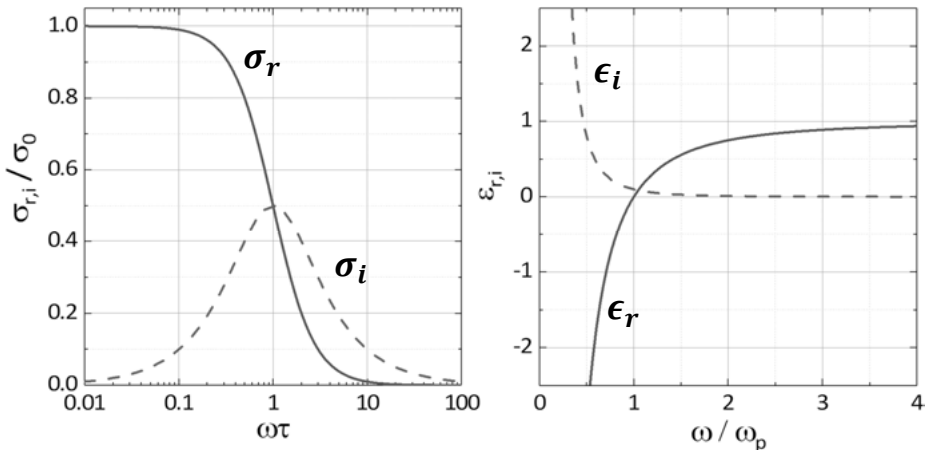


Abb. 7.4: Real- und Imaginärteil der elektrischen Leitfähigkeit (links) und der dielektrischen Funktion (rechts) von Metallen. Bei der Berechnung der dielektrischen Funktion wurde eine Streurrate $\tau^{-1} = 0.1\omega_p$ angenommen.

Mit der konstitutiven Relation $\mathbf{J}_q = \sigma(\omega)\mathbf{E}$ wird daraus

$$\begin{aligned}\epsilon_0 \epsilon(\omega) \mathbf{E} &= \epsilon_0 \mathbf{E} + \frac{i\sigma(\omega)}{\omega} \mathbf{E} \\ &= \epsilon_0 \underbrace{\left(1 + \frac{i\sigma(\omega)}{\omega\epsilon_0}\right)}_{=\epsilon(\omega)} \mathbf{E} \\ \epsilon(\omega) &= 1 + \frac{i\sigma(\omega)}{\omega\epsilon_0}.\end{aligned}\quad (\text{A7.7.20})$$

Durch Einsetzen der dynamischen Leitfähigkeit $\sigma(\omega)$ wird daraus

$$\begin{aligned}\epsilon(\omega) &= 1 - \frac{1}{\omega^2} \underbrace{\frac{ne^2}{m\epsilon_0}}_{=\omega_p^2} \frac{-i\omega\tau}{1 - i\omega\tau} \\ &= 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \frac{-i\omega\tau}{1 - i\omega\tau} \quad \text{mit } \omega_p^2 = \frac{ne^2}{m\epsilon_0}.\end{aligned}\quad (\text{A7.7.21})$$

Hierbei ist ω_p die Plasmafrequenz des Elektronensystems. Der Real- und Imaginärteil der dielektrischen Funktion:

$$\begin{aligned}\epsilon_r &= 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \frac{\omega^2\tau^2}{1 + \omega^2\tau^2} \\ \epsilon_i &= \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \frac{\omega\tau}{1 + \omega^2\tau^2}\end{aligned}\quad (\text{A7.7.22})$$

ist in Abb. 7.4 dargestellt. Für $\omega\tau \ll 1$ ist der Imaginärteil ϵ_i sehr viel größer als der Realteil ϵ_r . In diesem Limes ist der Reflexionskoeffizient nahe 1 (Totalreflexion) und eine elektromagnetische Welle fällt im Metall innerhalb der charakteristischen Längenskala δ auf $1/e$ ab. Diese Strecke wird als Skin-Tiefe bezeichnet.

- (c) Zur Berechnung der Skin-Eindringtiefe setzen wir $\mathbf{J}_q = \sigma(\omega)\mathbf{E}$ in Gleichung (A7.7.8) ein und erhalten

$$\begin{aligned}\left[\nabla^2 - \nabla : \nabla + \frac{\omega^2}{c^2}\right] \mathbf{B} &= -\mu_0 \nabla \times \mathbf{J}_q = -\mu_0 \sigma(\omega) \nabla \times \mathbf{E} \\ &= \underbrace{-i\omega\sigma(\omega)\mu_0}_{=1/\delta^2(\omega)} \mathbf{B} = \frac{\mathbf{B}}{\delta^2(\omega)}.\end{aligned}\quad (\text{A7.7.23})$$

Wir können daher als Magnetfeld-Eindringtiefe (Skin-Tiefe) folgende Größe identifizieren:²

$$\delta^2(\omega) = \frac{1}{-i\omega\sigma(\omega)\mu_0} = \underbrace{\frac{m}{\mu_0 ne^2}}_{=\delta_\infty^2} \frac{1 - i\omega\tau}{-i\omega\tau} = \delta_\infty^2 \frac{1 - i\omega\tau}{-i\omega\tau}.\quad (\text{A7.7.24})$$

² Die Skin-Tiefe $\delta(\omega)$ folgt direkt aus der Lösung der Differentialgleichung A7.7.23 unter Vernachlässigung des Verschiebungsstromes $\frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}$ mit dem Ansatz $\mathbf{B} = \mathbf{B}_0 \exp(-i\omega t)$ mit $\mathbf{B}_0 = \mathbf{B}_1 \exp(\mathbf{r}/\delta) + \mathbf{B}_2 \exp(\mathbf{r}/\delta)$.

Man beachte, dass die Skin-Tiefe δ_∞ (stoßloser Limes) mittels der Relation $\mu_0\epsilon_0 = 1/c^2$ auch durch die Plasmafrequenz ω_p ausgedrückt werden kann:

$$\delta_\infty^2 = \frac{m}{\mu_0 n e^2} = \frac{c^2}{\omega_p^2}. \quad (\text{A7.7.25})$$

Wir können Gleichung (A7.7.23) nun noch auf die Form einer Wellengleichung für **B** bringen

$$\left[\nabla^2 - \nabla : \nabla + \mu_0 \epsilon_0 \omega^2 \underbrace{\left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \frac{-i\omega\tau}{1 - i\omega\tau} \right)}_{=\epsilon(\omega)} \right] \mathbf{B} = 0 \quad (\text{A7.7.26})$$

und erkennen, dass die Berücksichtigung der Stromdichte \mathbf{J}_q auf der rechten Seite von (A7.7.23) wieder zu der Ersetzung $\epsilon_0 \rightarrow \epsilon_0\epsilon(\omega)$ führt.

Um zu zeigen, dass die elektrische Feldstärke **E**, genau wie **B**, einer Wellengleichung (A7.7.26) genügt, setzen wir die Stromdichte in Gleichung (A7.7.10) ein und erhalten

$$\left[\nabla^2 - \nabla : \nabla + \frac{\omega^2}{c^2} \right] \mathbf{E} = \mu_0 \frac{\partial \mathbf{J}_q}{\partial t} = \underbrace{-i\omega\mu_0\sigma(\omega)}_{1/\delta^2(\omega)} \mathbf{E} = \frac{\mathbf{E}}{\delta^2(\omega)}. \quad (\text{A7.7.27})$$

Dies lässt sich umschreiben in eine Gleichung, die mit (A7.7.26) bis auf die Ersetzung $\mathbf{B} \leftrightarrow \mathbf{E}$ identisch ist.

$$\left[\nabla^2 - \nabla : \nabla + \frac{\omega^2}{c^2} \underbrace{\left(1 + \frac{i\sigma(\omega)}{\omega\epsilon_0} \right)}_{=\epsilon(\omega)} \right] \mathbf{E} = 0. \quad (\text{A7.7.28})$$

Dieses Resultat bedeutet, dass auch das **E**-Feld aus dem Inneren des Metalls abgeschirmt wird und zwar mit derselben Abschirmlänge $\delta(\omega)$ wie das **B**-Feld.

- (d) Der Zusammenhang zwischen der dielektrischen Funktion $\epsilon(\omega)$ und der elektromagnetischen Skin-Tiefe $\delta(\omega)$ lautet

$$\begin{aligned} \epsilon(\omega) &= 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \frac{-i\omega\tau}{1 - i\omega\tau} \\ &= 1 - \frac{c^2}{\omega^2} \underbrace{\frac{\omega_p^2}{c^2}}_{=1/\delta_\infty^2} \frac{-i\omega\tau}{1 - i\omega\tau} = 1 - \frac{c^2}{\omega^2} \underbrace{\frac{1}{\delta_\infty^2} \frac{-i\omega\tau}{1 - i\omega\tau}}_{=1/\delta^2(\omega)} \\ &= 1 - \frac{c^2}{\omega^2} \frac{1}{\delta^2(\omega)}. \end{aligned} \quad (\text{A7.7.29})$$

A7.8 Leitfähigkeitstensor



Zeigen Sie, dass für einen tetragonalen Kristall die elektrische Leitfähigkeit in der Ebene senkrecht zur c -Achse isotrop ist.

Lösung

Für ein anisotropes Medium können wir allgemein

$$\mathbf{J}_q = \hat{\sigma} \cdot \mathbf{E}$$

schreiben, wobei $\hat{\sigma}$ der Leitfähigkeitstensor ist. Um das Anisotropieverhalten der Leitfähigkeit eines tetragonalen Kristalls zu untersuchen, führen wir Drehungen um die z - und x -Achse durch, die das tetragonale Gitter in sich selbst überführen. Solche Symmetrieeoperationen sind im allgemeinen Drehungen um einen Winkel θ und um eine Achse \mathbf{n} , die wir durch die Rotationsmatrix

$$\begin{aligned} R_{\mu\nu}(\mathbf{n}, \theta) &= \cos \theta \delta_{\mu\nu} + (1 - \cos \theta) \hat{\mathbf{n}}_\mu \hat{\mathbf{n}}_\nu - \sin \theta \epsilon_{\mu\nu\lambda} \hat{\mathbf{n}}_\lambda \\ &= \begin{pmatrix} \cos \theta + (1 - \cos \theta) \hat{\mathbf{n}}_x^2 & -\sin \theta \hat{\mathbf{n}}_z & \sin \theta \hat{\mathbf{n}}_y \\ \sin \theta \hat{\mathbf{n}}_z & \cos \theta + (1 - \cos \theta) \hat{\mathbf{n}}_y^2 & -\sin \theta \hat{\mathbf{n}}_x \\ -\sin \theta \hat{\mathbf{n}}_y & \sin \theta \hat{\mathbf{n}}_x & \cos \theta + (1 - \cos \theta) \hat{\mathbf{n}}_z^2 \end{pmatrix}_{\mu\nu} \end{aligned} \quad (\text{A7.8.1})$$

beschreiben können. Hierbei ist $\epsilon_{\mu\nu\lambda}$ der vollständig antisymmetrische Tensor: $\epsilon_{\mu\nu\lambda} = \pm 1$ für gerade [(123), (231), (312)] bzw. ungerade [(213) etc.] Permutationen von $\mu\nu\lambda$ und 0 sonst, insbesondere wenn 2 oder mehr Indizes gleich sind. Die inverse Matrix entspricht der inversen Drehung:

$$\begin{aligned} \mathbf{R}^{-1}(\mathbf{n}, \theta) &= \mathbf{R}(\mathbf{n}, -\theta) = \mathbf{R}^T(\mathbf{n}, \theta) \\ &= \begin{pmatrix} \cos \theta + (1 - \cos \theta) \hat{\mathbf{n}}_x^2 & \sin \theta \hat{\mathbf{n}}_z & -\sin \theta \hat{\mathbf{n}}_y \\ -\sin \theta \hat{\mathbf{n}}_z & \cos \theta + (1 - \cos \theta) \hat{\mathbf{n}}_y^2 & \sin \theta \hat{\mathbf{n}}_x \\ \sin \theta \hat{\mathbf{n}}_y & -\sin \theta \hat{\mathbf{n}}_x & \cos \theta + (1 - \cos \theta) \hat{\mathbf{n}}_z^2 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{A7.8.2})$$

Als Spezialfälle hiervon können wir Drehungen um die $\hat{\mathbf{z}}$ -Achse

$$\mathbf{R}(\hat{\mathbf{z}}, \theta) \equiv \mathbf{U}_\theta^z = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta & 0 \\ \sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{A7.8.3})$$

und um die $\hat{\mathbf{x}}$ -Achse betrachten:

$$\mathbf{R}(\hat{\mathbf{x}}, \theta) \equiv \mathbf{U}_\theta^x = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & -\sin \theta \\ 0 & \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}. \quad (\text{A7.8.4})$$

Für einen Kristall gegebener Symmetrie können wir jetzt Transformationen untersuchen, welche denselben invariant lassen:

$$\mathbf{J}'_q = \mathbf{U}_\theta^{\hat{\mathbf{n}}} \cdot \mathbf{J}_q, \quad \mathbf{E}' = \mathbf{U}_\theta^{\hat{\mathbf{n}}} \cdot \mathbf{E} \quad (\text{A7.8.5})$$

Damit transformiert sich die elektronische Leitfähigkeit gemäß:

$$\sigma' = \mathbf{U}_{\theta}^{\hat{n}} \cdot \sigma \cdot \{\mathbf{U}_{\theta}^{\hat{n}}\}^{-1} = \sigma. \quad (\text{A7.8.6})$$

Die letzte Gleichheit entspricht dem Fall, dass die Symmetrieoperation einer Gittersymmetrie entspricht. Für tetragonale Kristalle gibt es zwei solche Symmetrieoperationen (90°-Drehungen um die z -Achse: vierzählige Symmetrieachse; 180°-Drehungen um die x -Achse: zweizählige Symmetrieachse)

$$\sigma = \mathbf{U}_{\pi}^x \cdot \sigma \cdot \{\mathbf{U}_{\pi}^x\}^{-1} \quad (\text{A7.8.7})$$

$$\sigma = \mathbf{U}_{\frac{\pi}{2}}^z \cdot \sigma \cdot \{\mathbf{U}_{\frac{\pi}{2}}^z\}^{-1}. \quad (\text{A7.8.8})$$

Aus der Bedingung (A7.8.7) ergibt sich

$$\begin{aligned} \sigma &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & -\sigma_{xy} & -\sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & -\sigma_{yy} & -\sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & -\sigma_{zy} & -\sigma_{zz} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & -\sigma_{xy} & -\sigma_{xz} \\ -\sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ -\sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{A7.8.9})$$

Daraus folgen sofort die Bedingungen

$$\sigma_{xy} = -\sigma_{xy} = 0 \quad (\text{A7.8.10})$$

$$\sigma_{yx} = -\sigma_{yx} = 0 \quad (\text{A7.8.11})$$

$$\sigma_{xz} = -\sigma_{xz} = 0 \quad (\text{A7.8.12})$$

$$\sigma_{zx} = -\sigma_{zx} = 0 \quad (\text{A7.8.13})$$

und der Leitfähigkeitstensor reduziert sich auf die Form

$$\sigma = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ 0 & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{pmatrix} \quad (\text{A7.8.14})$$

Aus der zweiten Bedingung (A7.8.8) ergibt sich

$$\begin{aligned} \sigma &= \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} -\sigma_{xy} & \sigma_{xx} & \sigma_{xz} \\ -\sigma_{yy} & \sigma_{yx} & \sigma_{yz} \\ -\sigma_{zy} & \sigma_{zx} & \sigma_{zz} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \sigma_{yy} & -\sigma_{yx} & -\sigma_{yz} \\ -\sigma_{xy} & \sigma_{xx} & \sigma_{xz} \\ -\sigma_{zy} & \sigma_{zx} & \sigma_{zz} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (\text{A7.8.15})$$

Dies liefert die zusätzlichen Bedingungen

$$\sigma_{yy} = \sigma_{xx} \quad (\text{A7.8.16})$$

$$\sigma_{yz} = \sigma_{xz} = 0 \quad (\text{A7.8.17})$$

$$\sigma_{zy} = \sigma_{zx} = 0, \quad (\text{A7.8.18})$$

so dass wir folgenden Leitfähigkeitstensor erhalten:

$$\sigma = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{xx} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{zz} \end{pmatrix} \quad (\text{A7.8.19})$$

Der so gefundene Leitfähigkeitstensor eines Metalls mit tetragonaler Gittersymmetrie ist also isotrop in der xy -Ebene.

A7.9 Elektronische spezifische Wärmekapazität von Kupfer



Wir diskutieren einige thermische Eigenschaften von Kupfer.

- Berechnen Sie im Modell freier Elektronen für Kupfer den elektronischen Beitrag zur spezifischen Wärmekapazität $c_{V,\text{el}}$ bei der Temperatur $T = 300 \text{ K}$.
- Schätzen Sie den Beitrag der Phononen $c_{V,\text{ph}}$ bei dieser Temperatur ab.
- Bei welcher Temperatur gilt $c_{V,\text{el}} = c_{V,\text{ph}}$?
- Berechnen Sie für Kupfer die Sommerfeld-Konstante $\gamma = c_{V,\text{el}}/T$ und vergleichen Sie diese mit dem experimentell ermittelten Wert $\gamma_{\text{exp}} = 97,53 \text{ J}/(\text{m}^3 \text{K}^2)$.

Benutzen Sie für Kupfer die Elektronendichte $n = N/V = 8.45 \times 10^{28} \text{ m}^{-3}$ und die Debye-Temperatur $\Theta_D = 343 \text{ K}$.

Lösung

- Der elektronische Beitrag zur spezifischen Wärmekapazität lautet (siehe hierzu *Festkörperphysik*, R. Gross, A. Marx)

$$c_{V,\text{el}}(T) = \frac{\pi^2}{3} \underbrace{N_F}_{\frac{3}{2} \frac{n}{\mu}} k_B^2 T = \frac{\pi^2}{2} n \frac{k_B^2 T}{\mu} = \frac{\pi^2}{2} n k_B \frac{T}{T_F}. \quad (\text{A7.9.1})$$

Um die Verwendung verschiedener Notationen zu klären, sei darauf hingewiesen, dass $N_F \equiv D(\epsilon_F)/V$. N_F ist also die Zahl der Zustände pro Volumen und Energie, während $D(\epsilon_F)$ nur die Zahl der Zustände pro Energie ist. Die Fermi-Temperatur T_F lässt sich aus der Dichte n berechnen. Das Resultat lautet

$$T_F = \frac{\epsilon_F}{k_B} = \frac{\hbar^2}{2mk_B} (3\pi^2 n)^{\frac{2}{3}} = 8.1487 \times 10^4 \text{ K}. \quad (\text{A7.9.2})$$

Daraus ergibt sich sofort

$$c_{V,\text{el}}(T) = 7.065 \times 10^1 \frac{\text{J}}{\text{m}^3 \text{K}} \cdot T [\text{K}]. \quad (\text{A7.9.3})$$

Bei $T = 300 \text{ K}$ ergibt sich schließlich

$$c_{V,\text{el}}(T = 300 \text{ K}) = 2.12 \times 10^4 \frac{\text{J}}{\text{m}^3 \text{K}}. \quad (\text{A7.9.4})$$

- (b) Als nächstes schätzen wir den Phononen-Beitrag zur spezifischen Wärmekapazität ab. Bei $T = 300 \text{ K}$, also $T \simeq \Theta_{\text{D}}$, gilt die klassische Näherung

$$c_{V,\text{ph}}^{\text{kl}} = 3nk_{\text{B}} = 3.5 \times 10^6 \frac{\text{J}}{\text{m}^3 \text{K}}. \quad (\text{A7.9.5})$$

Bei $T = 300 \text{ K}$ ergibt sich als Verhältnis der beiden spezifischen Wärmen zu

$$\frac{c_{V,\text{el}}(T = 300 \text{ K})}{c_{V,\text{ph}}^{\text{kl}}} = 6.06 \times 10^{-3}. \quad (\text{A7.9.6})$$

Der Beitrag des Elektronensystems beträgt also weniger als 1%.

- (c) Die Temperatur T_0 , bei der die Beiträge zur spezifischen Wärme von den Phononen und den Elektronen übereinstimmen, können wir wie folgt aus dem Tieftemperaturlimites von $c_{V,\text{ph}}$ (vergleiche hierzu Aufgabe A6.2) abschätzen:

$$c_{V,\text{ph}}(T_0) \stackrel{T \ll \Theta_{\text{D}}}{\approx} \frac{12}{5} \pi^4 n k_{\text{B}} \left(\frac{T_0}{\Theta_{\text{D}}} \right)^3 = c_{V,\text{el}}(T_0) = \frac{\pi^2}{2} n k_{\text{B}} \frac{T_0}{T_{\text{F}}}. \quad (\text{A7.9.7})$$

Daraus folgt, dass beide spezifischen Wärmen für

$$T_0^2 = \Theta_{\text{D}}^2 \cdot \frac{5}{24\pi^2} \frac{\Theta_{\text{D}}}{T_{\text{F}}} \approx (3.233 \text{ K})^2, \quad (\text{A7.9.8})$$

also bei $T_0 = 3.233 \text{ K}$ übereinstimmen.

- (d) Die Sommerfeld-Konstante für Kupfer ergibt sich zu

$$\gamma = \frac{c_{V,\text{el}}(T)}{T} = 70.65 \frac{\text{J}}{\text{m}^3 \text{K}^2} \quad \left(\gamma_{\text{exp}} = 97.53 \frac{\text{J}}{\text{m}^3 \text{K}^2} \right). \quad (\text{A7.9.9})$$

Die Diskrepanz zwischen dem theoretischen und experimentellen Werte rührt daher, dass die Elektronen nicht wirklich *frei* sind, wie es im Sommerfeld-Modell angenommen wird. Bandstruktur- und (Fermi-Flüssigkeits-) Wechselwirkungs-Effekte lassen sich jedoch manchmal in einer renormierten effektiven („thermischen“) Masse m_{th}^* zusammenfassen:

$$\begin{aligned} T_{\text{F}}^* &= \frac{\epsilon_{\text{F}}^*}{k_{\text{B}}} = \frac{\hbar^2}{2m_{\text{th}}^* k_{\text{B}}} (3\pi^2 n)^{\frac{2}{3}} = \frac{m}{m_{\text{th}}^*} T_{\text{F}}^{\text{frei}} \\ \gamma^* &= \frac{m_{\text{th}}^*}{m} \gamma^{\text{frei}}. \end{aligned} \quad (\text{A7.9.10})$$

Für Cu würde man dann

$$m_{\text{th}}^* = 1.337 m \quad (\text{A7.9.11})$$

erhalten.

A7.10 Ladungstransport bei Vorhandensein von zwei Ladungsträgersorten



Betrachten Sie ein metallisches System mit zwei Ladungsträgersorten. Die Ladungsträger sollen die gleiche Dichte n aber entgegengesetzte Ladung ($q_1 = e$ und $q_2 = -e$) und ferner unterschiedliche Massen m_1 und m_2 sowie unterschiedliche Streuzeiten τ_1 und τ_2 besitzen. Berechnen Sie

- (a) den Hall-Koeffizienten R_H und
- (b) den Magnetwiderstand $\Delta\rho(B_z) = \rho(B_z) - \rho(0)$, wobei B_z das in der z -Richtung angelegte Magnetfeld ist. Das magnetische Feld B_z sei genügend klein, so dass die Zyklotronfrequenz $\omega_c = eB_z/m$ wesentlich kleiner ist als die elektronische Relaxationsrate $1/\tau$.

Lösung

Zu Beginn sei hier noch einmal kurz auf die Ableitung des gewöhnlichen Hall-Effektes im Rahmen des Drude-Modells eingegangen. In Gegenwart eines Magnetfeldes \mathbf{B} (Lorentz-Kraft) verallgemeinert sich die Relaxationsgleichung für die elektronische Stromdichte \mathbf{J}_q (vgl. Aufgabe A7.7) zu

$$\left[-i\omega + \frac{1}{\tau} \right] \mathbf{J}_q = \frac{ne^2}{m} [\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}], \quad (\text{A7.10.1})$$

wobei wir eine harmonische Zeitabhängigkeit ($\partial/\partial t \rightarrow -i\omega$) der Felder angenommen haben. Durch die Einführung der vektoriellen Zyklotronfrequenz

$$\boldsymbol{\omega}_c = \frac{e\mathbf{B}}{m} \quad (\text{A7.10.2})$$

vereinfacht sich dies mit $\mathbf{J}_q = qn\mathbf{v}$ zu:

$$\left[-i\omega + \frac{1}{\tau} \right] \mathbf{J}_q + \boldsymbol{\omega}_c \times \mathbf{J}_q = \frac{ne^2}{m} \mathbf{E}. \quad (\text{A7.10.3})$$

Im Limes $\omega\tau \ll 1$ lässt sich diese Relaxationsgleichung auf die Form bringen

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_q &= \sigma_0 \mathbf{E} + \mathbf{J}_q \times \mathbf{s}_c \\ \sigma_0 &= \frac{1}{\rho_0} = \frac{ne^2\tau}{m} \\ \mathbf{s}_c &= \boldsymbol{\omega}_c \tau. \end{aligned} \quad (\text{A7.10.4})$$

Diese Gleichung lässt sich einfach lösen, indem wir das vektorielle Produkt

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_q \times \mathbf{s}_c &= \sigma_0 \mathbf{E} \times \mathbf{s}_c + (\mathbf{J}_q \times \mathbf{s}_c) \times \mathbf{s}_c \\ &= \sigma_0 \mathbf{E} \times \mathbf{s}_c - \mathbf{s}_c^2 \mathbf{J}_q + \mathbf{s}_c (\mathbf{s}_c \cdot \mathbf{J}_q) \end{aligned} \quad (\text{A7.10.5})$$

berechnen. Dies führt sofort auf das Resultat

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_q &= \frac{\sigma_0}{1 + \mathbf{s}_c^2} \{ \mathbf{E} - \mathbf{s}_c \times \mathbf{E} + \mathbf{s}_c (\mathbf{s}_c \cdot \mathbf{E}) \} \\ &\stackrel{\mathbf{B}=B_z \hat{z}}{=} \frac{\sigma_0}{1 + s_c^2} \begin{pmatrix} 1 & s_c & 0 \\ -s_c & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 + s_c^2 \end{pmatrix} \cdot \mathbf{E}, \end{aligned} \quad (\text{A7.10.6})$$

wobei $s_c = eB_z\tau/m = \omega_c\tau$ definiert wurde. Für den Hall-Effekt ist der transversale Strom relevant:

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_{q\perp} &= \begin{pmatrix} J_{qx} \\ J_{qy} \end{pmatrix} = \frac{\sigma_0}{1 + s_c^2} \begin{pmatrix} 1 & s_c \\ -s_c & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} \end{pmatrix} \cdot \mathbf{E}_\perp = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{E}_\perp \end{aligned} \quad (\text{A7.10.7})$$

$$\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \frac{\sigma_0}{1 + s_c^2} ; \quad \sigma_{xy} = -\sigma_{yx} = \frac{\sigma_0 s_c}{1 + s_c^2} . \quad (\text{A7.10.8})$$

Der inverse Zusammenhang zwischen \mathbf{E}_\perp und $\mathbf{J}_{q\perp}$ lautet

$$\mathbf{E}_\perp = \boldsymbol{\sigma}^{-1} \cdot \mathbf{J}_{q\perp} \equiv \boldsymbol{\rho} \cdot \mathbf{J}_{q\perp} . \quad (\text{A7.10.9})$$

Dies definiert den Widerstandstensor

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\rho} &= \begin{pmatrix} \rho_{xx} & \rho_{xy} \\ \rho_{yx} & \rho_{yy} \end{pmatrix} = \frac{1}{|\boldsymbol{\sigma}|} \begin{pmatrix} \sigma_{yy} & -\sigma_{xy} \\ -\sigma_{yx} & \sigma_{xx} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2} \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & -\sigma_{xy} \\ +\sigma_{xy} & \sigma_{xx} \end{pmatrix} \\ |\boldsymbol{\sigma}| &= \sigma_{xx}\sigma_{yy} - \sigma_{xy}\sigma_{yx} = \sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2 . \end{aligned} \quad (\text{A7.10.10})$$

Zur Diskussion des Hall-Effektes tragen nun die folgenden relevanten Größe bei:

- Das Hall-Feld E_y , welches wir unter der Bedingung $J_{q,y} = 0$ bekommen:

$$E_y = \rho_{yx} J_{q,x} , \quad \rho_{yx} = -\frac{\sigma_{yx}}{|\boldsymbol{\sigma}|} = \frac{\sigma_{xy}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2} \equiv R_H B_z . \quad (\text{A7.10.11})$$

Diese Relation definiert den Hall-Koeffizienten

$$R_H = \frac{\rho_{yx}}{B_z} = \frac{1}{B_z} \frac{\sigma_{xy}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2} . \quad (\text{A7.10.12})$$

Durch Einsetzen von σ_{xx} und σ_{xy} erhalten wir für den Hall-Koeffizienten

$$R_H = \frac{s_c}{\sigma_0 B_z} = \frac{\mu}{\sigma_0} = \frac{1}{ne} , \quad \text{mit } \mu = \frac{e\tau}{m} . \quad (\text{A7.10.13})$$

Hierbei bezeichnet μ die *Beweglichkeit* der Ladungsträger.

- Der longitudinale spezifische Widerstand ρ_{xx} ist definiert durch

$$E_x = \rho_{xx} J_{q,x} , \quad \rho_{xx} = +\frac{\sigma_{yy}}{|\boldsymbol{\sigma}|} = \frac{\sigma_{xx}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2} . \quad (\text{A7.10.14})$$

Durch Einsetzen von σ_{xx} und σ_{xy} finden wir für ρ_{xx} das bekannte Resultat

$$\rho_{xx} = \frac{1}{\sigma_0} = \rho_0 , \quad (\text{A7.10.15})$$

d. h. ρ_{xx} hängt für eine Ladungsträgersorte nicht vom Magnetfeld ab.

Man beachte, dass die Magnetfeldunabhängigkeit von ρ_{xx} für eine Ladungsträgersorte nur dadurch zustande kommt, dass in Querrichtung kein Strom fließen kann ($J_{q,y} = 0$). In diesem Fall kompensieren sich die Querkraft auf die Ladungsträger aufgrund des Hall-Feldes und die Lorentz-Kraft durch das angelegte Magnetfeld gerade. Würde man eine Probegeometrie verwenden, bei der das Hall-Feld kurzgeschlossen ist (eine solche Probegeometrie stellt z. B. eine Corbino-Scheibe dar), so würde sich ein anderes Resultat ergeben. Aus der dann vorliegenden Randbedingung $E_y = 0$ würde sich mit $J_{q,x} \neq 0$ aus (A7.10.11) sofort $\rho_{xy} = \sigma_{xy} = 0$ ergeben. Für den Längswiderstand ergibt sich nach (A7.10.14) dann

$$\rho_{xx} = \frac{\sigma_{xx}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2} = \frac{1}{\sigma_{xx}} = \frac{1 + s_c^2}{\sigma_0} = \rho_0 [1 + (\omega_c \tau)^2]. \quad (\text{A7.10.16})$$

Da $\omega_c \propto B_z$, nimmt der Längswiderstand also proportional zu B_z^2 zu.

Betrachten wir nun den Fall, dass in einem System zwei Ladungsträgersorten vorhanden sind, die durch die Größen n_i, q_i, m_i und τ_i ($i = 1, 2$) charakterisiert sind. In diesem Fall lassen sich alle bisher abgeleiteten Resultate verallgemeinern, indem wir identifizieren

$$\mathbf{J}_{q\perp} = \mathbf{J}_{q1\perp} + \mathbf{J}_{q2\perp} = (\boldsymbol{\sigma}_1 + \boldsymbol{\sigma}_2) \cdot \mathbf{E}_\perp. \quad (\text{A7.10.17})$$

(a) Der Hall-Koeffizient lautet dann

$$R_H = \frac{1}{B_z} \frac{\sum_i \sigma_{i,xy}}{(\sum_i \sigma_{i,xx})^2 + (\sum_i \sigma_{i,xy})^2}. \quad (\text{A7.10.18})$$

Setzen wir die Ausdrücke für $\sigma_{i,xx}$ und $\sigma_{i,xy}$ ein und beschränken uns auf die führende Ordnung in der kleinen Größe $s_c = \omega_c \tau$, so erhalten wir

$$R_H = \frac{1}{B_z} \frac{\sum_i \sigma_{0i} s_{ci}}{\sum_i \sigma_{0i}} \quad \sigma_{0i} = \frac{n_i q_i^2 \tau_i}{m_i}, \quad s_{ci} = \omega_{ci} \tau_i = \frac{|q_i| B_z}{m_i} \tau_i = \mu_i B_z. \quad (\text{A7.10.19})$$

Hier haben wir die Beweglichkeiten

$$\mu_i = \frac{|q_i| \tau_i}{m_i}, \quad i = 1, 2 \quad (\text{A7.10.20})$$

eingeführt. Einsetzen liefert

$$\begin{aligned} R_H &= \frac{1}{B_z} \frac{\sigma_{01} \mu_1 + \sigma_{02} \mu_2}{(\sigma_{01} + \sigma_{02})^2} B_z = \frac{\overbrace{\sigma_{01}^2 \frac{\mu_1}{\sigma_{01}}}^{R_{H1}} + \overbrace{\sigma_{02}^2 \frac{\mu_2}{\sigma_{02}}}^{R_{H2}}}{(\sigma_{01} + \sigma_{02})^2} \\ &= \frac{R_{H1} \sigma_{01}^2 + R_{H2} \sigma_{02}^2}{(\sigma_{01} + \sigma_{02})^2} = \frac{R_{H1} \frac{\sigma_{01}^2}{\sigma_{01} \sigma_{02}} + R_{H2} \frac{\sigma_{02}^2}{\sigma_{01} \sigma_{02}}}{(\sigma_{01} + \sigma_{02})^2 / (\sigma_{01} \sigma_{02})} \\ &= \frac{R_{H1} \rho_{02}^2 + R_{H2} \rho_{01}^2}{(\rho_{01} + \rho_{02})^2}, \quad \rho_{0i} = 1/\sigma_{0i}, \quad R_{Hi} = \frac{1}{n_i q_i}. \end{aligned} \quad (\text{A7.10.21})$$

Drücken wir die Leitfähigkeiten der beiden Ladungsträgersorten σ_{0i} durch die Beweglichkeiten μ_i aus, d. h. $\sigma_{0i} = n_i |q_i| \mu_i$, so können wir schreiben

$$\begin{aligned}
 R_H &= \frac{R_{H1} n_1^2 q_1^2 \mu_1^2 + R_{H2} n_2^2 q_2^2 \mu_2^2}{(n_1 |q_1| \mu_1 + n_2 |q_2| \mu_2)^2} \\
 &\stackrel{n_1=n_2=n}{=} \frac{R_{H1} q_1^2 \mu_1^2 + R_{H2} q_2^2 \mu_2^2}{(|q_1| \mu_1 + |q_2| \mu_2)^2} \\
 &\stackrel{q_1=-q_2=e}{=} \frac{1}{ne} \frac{\mu_1^2 - \mu_2^2}{(\mu_1 + \mu_2)^2}. \quad (A7.10.22)
 \end{aligned}$$

Wir erkennen somit, dass der Hall-Koeffizient R_H für den Fall $n_1 = n_2, q_1 = -q_2$ verschwindet, wenn die Beweglichkeiten der beiden Ladungsträgersorten gleich sind. Dieses Ergebnis haben wir natürlich intuitiv erwartet.

- (b) Schließlich berechnen wir die Magnetfeld-Abhängigkeit des longitudinalen spezifischen Widerstands ρ_{xx} , die wie folgt definiert werden kann:

$$\begin{aligned}
 \Delta\rho(B_z) &= \rho_{xx}(B_z) - \rho_{xx}(0) \\
 &= \frac{\sum_i \sigma_{i,xx}}{(\sum_i \sigma_{i,xx})^2 + (\sum_i \sigma_{i,xy})^2} - \frac{1}{\sum_i \sigma_{i,xx}(0)} \quad (A7.10.23)
 \end{aligned}$$

Zur Vereinfachung der Rechnung definieren wir

$$\tilde{\sigma}_{0i} = \frac{\sigma_{0i}}{1 + s_{ci}^2}, \quad i = 1, 2 \quad (A7.10.24)$$

und erhalten

$$\begin{aligned}
 \Delta\rho(B_z) &= \frac{\tilde{\sigma}_{01} + \tilde{\sigma}_{02}}{(\tilde{\sigma}_{01} + \tilde{\sigma}_{02})^2 + (\tilde{\sigma}_{01} s_{c1} + \tilde{\sigma}_{02} s_{c2})^2} - \frac{1}{\sigma_{01} + \sigma_{02}} \\
 &= \frac{1}{\tilde{\sigma}_{01} + \tilde{\sigma}_{02} + \frac{(\tilde{\sigma}_{01} s_{c1} + \tilde{\sigma}_{02} s_{c2})^2}{\tilde{\sigma}_{01} + \tilde{\sigma}_{02}}} - \frac{1}{\tilde{\sigma}_{01} + \tilde{\sigma}_{02} + \tilde{\sigma}_{01} s_{c1}^2 + \tilde{\sigma}_{02} s_{c2}^2} \\
 &= \frac{1}{\tilde{\sigma}_{01} + \tilde{\sigma}_{02}} \left\{ \frac{1}{1 + \frac{(\tilde{\sigma}_{01} s_{c1} + \tilde{\sigma}_{02} s_{c2})^2}{(\tilde{\sigma}_{01} + \tilde{\sigma}_{02})^2}} - \frac{1}{1 + \frac{\tilde{\sigma}_{01} s_{c1}^2 + \tilde{\sigma}_{02} s_{c2}^2}{(\tilde{\sigma}_{01} + \tilde{\sigma}_{02})}} \right\} \\
 &= \frac{1}{\tilde{\sigma}_{01} + \tilde{\sigma}_{02}} \frac{\frac{\tilde{\sigma}_{01} s_{c1}^2 + \tilde{\sigma}_{02} s_{c2}^2}{\tilde{\sigma}_{01} + \tilde{\sigma}_{02}} - \frac{(\tilde{\sigma}_{01} s_{c1} + \tilde{\sigma}_{02} s_{c2})^2}{(\tilde{\sigma}_{01} + \tilde{\sigma}_{02})^2}}{\left(1 + \frac{(\tilde{\sigma}_{01} s_{c1} + \tilde{\sigma}_{02} s_{c2})^2}{(\tilde{\sigma}_{01} + \tilde{\sigma}_{02})^2}\right) \left(1 + \frac{\tilde{\sigma}_{01} s_{c1}^2 + \tilde{\sigma}_{02} s_{c2}^2}{(\tilde{\sigma}_{01} + \tilde{\sigma}_{02})}\right)} \\
 &= \frac{\tilde{\sigma}_{01} \tilde{\sigma}_{02} (s_{c1} - s_{c2})^2}{(\tilde{\sigma}_{01} + \tilde{\sigma}_{02})^3} \frac{1}{\left(1 + \frac{(\tilde{\sigma}_{01} s_{c1} + \tilde{\sigma}_{02} s_{c2})^2}{(\tilde{\sigma}_{01} + \tilde{\sigma}_{02})^2}\right) \left(1 + \frac{\tilde{\sigma}_{01} s_{c1}^2 + \tilde{\sigma}_{02} s_{c2}^2}{(\tilde{\sigma}_{01} + \tilde{\sigma}_{02})}\right)} \\
 &\stackrel{s_{ci} \ll 1}{=} \frac{\sigma_{01} \sigma_{02} (s_{c1} - s_{c2})^2}{(\sigma_{01} + \sigma_{02})^3} = \frac{1}{\sigma_{01} + \sigma_{02}} \frac{\sigma_{01} \sigma_{02}}{(\sigma_{01} + \sigma_{02})^2} (\mu_1 - \mu_2)^2 B_z^2. \quad (A7.10.25)
 \end{aligned}$$

Dieses Resultat lässt sich noch ein wenig umformen, indem wir die spezifischen Widerstände

$$\begin{aligned}\rho_{0i} &= \frac{1}{\sigma_{0i}}, \quad i = 1, 2 \\ \rho_0 &= \frac{1}{\sigma_{01} + \sigma_{02}} = \frac{\rho_{01}\rho_{02}}{\rho_{01} + \rho_{02}}\end{aligned}\quad (\text{A7.10.26})$$

eingeführen. Dann erhalten wir als Resultat

$$\Delta\rho(B_z) = \rho_0 \frac{\rho_{01}\rho_{02}}{(\rho_{01} + \rho_{02})^2} (\mu_1 - \mu_2)^2 B_z^2. \quad (\text{A7.10.27})$$

Wir sehen, dass der Magnetwiderstand immer positiv ist und für kleine Felder proportional zu B_z^2 ansteigt. Für $\mu_1 = \mu_2$ verschwindet der Magnetwiderstand.

A7.11 Sommerfeld-Entwicklung

Zeigen Sie, dass das Integral



$$A(T) = \int_0^\infty d\epsilon_{\mathbf{k}} D(\epsilon_{\mathbf{k}}) a(\epsilon_{\mathbf{k}}) f(\epsilon_{\mathbf{k}})$$

über die Zustandsdichte $D(\epsilon_{\mathbf{k}}) = (m/\pi^2 \hbar^2) \sqrt{2m\epsilon_{\mathbf{k}}}$ und die Fermi-Funktion $f(\epsilon_{\mathbf{k}}) = \{\exp[(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu(T))/k_B T] + 1\}^{-1}$ bei endlichen Temperaturen folgende Tieftemperaturentwicklung (Sommerfeld-Entwicklung) hat:

$$\lim_{T \rightarrow 0} A(T) = \int_0^{\mu(T)} d\epsilon_{\mathbf{k}} a(\epsilon_{\mathbf{k}}) D(\epsilon_{\mathbf{k}}) + \frac{(\pi k_B T)^2}{6} \left(\frac{d}{d\epsilon_{\mathbf{k}}} [D(\epsilon_{\mathbf{k}}) a(\epsilon_{\mathbf{k}})] \right)_{\epsilon_{\mathbf{k}} = \mu(T)}.$$

Hinweis: Substituieren Sie $[\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu(T)]/k_B T = x$ und verwenden Sie $\int_0^\infty \frac{dx}{e^x + 1} = \frac{\pi^2}{12}$.

Berechnen Sie ferner das Integral

$$B(T) = \int_0^\infty d\epsilon_{\mathbf{k}} D(\epsilon_{\mathbf{k}}) a(\epsilon_{\mathbf{k}}) \left(-\frac{\partial f(\epsilon_{\mathbf{k}})}{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}} \right)$$

über die Energieableitung der Fermi-Dirac-Verteilung

$$-\frac{\partial f(\epsilon_{\mathbf{k}})}{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}} = \frac{1}{4k_B T} \frac{1}{\cosh^2 \frac{\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu}{2k_B T}}.$$

Lösung

Die physikalische Größe

$$A(T) = \int_0^{\infty} d\epsilon_{\mathbf{k}} D(\epsilon_{\mathbf{k}}) a(\epsilon_{\mathbf{k}}) f(\epsilon_{\mathbf{k}}) \quad (\text{A7.11.1})$$

stellt eine Impulssumme dar, bei der wir über alle möglichen \mathbf{k} gewichtet mit der Zustandsdichte $D(\epsilon_{\mathbf{k}})$ und der Besetzungswahrscheinlichkeit $f(\epsilon_{\mathbf{k}})$ aufsummieren. Beispiele sind die Teilchendichte n , wobei $a(\epsilon_{\mathbf{k}}) = 1$, oder die Energiedichte, wobei $a(\epsilon_{\mathbf{k}}) = \epsilon_{\mathbf{k}}$.

Mit der Abkürzung $C(\epsilon_{\mathbf{k}}) = D(\epsilon_{\mathbf{k}})a(\epsilon_{\mathbf{k}})$ und Verwendung der Energie $\xi_{\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}} - \mu$ bezogen auf das chemische Potenzial μ erhalten wir

$$\begin{aligned} A(T) &= \int_{-\mu}^{\infty} d\xi_{\mathbf{k}} C(\mu + \xi_{\mathbf{k}}) f(\xi_{\mathbf{k}}) \quad (\text{A7.11.2}) \\ &= \underbrace{\int_{-\mu}^0 d\xi_{\mathbf{k}} C(\mu + \xi_{\mathbf{k}}) f(\xi_{\mathbf{k}})}_I + \underbrace{\int_0^{\mu} d\xi_{\mathbf{k}} C(\mu + \xi_{\mathbf{k}}) f(\xi_{\mathbf{k}})}_{II} + \underbrace{\int_{\mu}^{\infty} d\xi_{\mathbf{k}} C(\mu + \xi_{\mathbf{k}}) f(\xi_{\mathbf{k}})}_{III} . \end{aligned}$$

Ersetzen wir $\xi_{\mathbf{k}}$ durch $-\xi_{\mathbf{k}}$, so können wir Integral I wie folgt umschreiben

$$\begin{aligned} I &= \int_0^{\mu} d\xi_{\mathbf{k}} C(\mu - \xi_{\mathbf{k}}) f(-\xi_{\mathbf{k}}) = \int_0^{\mu} d\xi_{\mathbf{k}} C(\mu - \xi_{\mathbf{k}}) [1 - f(\xi_{\mathbf{k}})] \\ &= \underbrace{\int_0^{\mu} d\xi_{\mathbf{k}} C(\mu - \xi_{\mathbf{k}})}_{IV} - \underbrace{\int_0^{\mu} d\xi_{\mathbf{k}} C(\mu - \xi_{\mathbf{k}}) f(\xi_{\mathbf{k}})}_V . \end{aligned}$$

Wir formen ferner Integral IV wie folgt um

$$IV \stackrel{\xi_{\mathbf{k}} \rightarrow -\xi_{\mathbf{k}} - \mu}{=} \int_0^{\mu} d\xi_{\mathbf{k}} C(\mu + \xi_{\mathbf{k}}) \stackrel{\mu + \xi_{\mathbf{k}} \rightarrow \epsilon_{\mathbf{k}}}{=} \int_0^{\mu} d\epsilon_{\mathbf{k}} C(\epsilon_{\mathbf{k}}) .$$

Damit erhalten wir

$$\begin{aligned} A(T) &= \underbrace{\int_0^{\mu} d\epsilon_{\mathbf{k}} C(\epsilon_{\mathbf{k}})}_{IV} + \int_0^{\mu} d\xi_{\mathbf{k}} \left[\underbrace{C(\mu + \xi_{\mathbf{k}})}_{II} - \underbrace{C(\mu - \xi_{\mathbf{k}})}_V \right] f(\xi_{\mathbf{k}}) \quad (\text{A7.11.3}) \\ &\quad + \underbrace{\int_{\mu}^{\infty} d\xi_{\mathbf{k}} C(\mu + \xi_{\mathbf{k}}) f(\xi_{\mathbf{k}})}_{III} . \end{aligned}$$

Wegen

$$\begin{aligned} \int_{\mu}^{\infty} d\xi_{\mathbf{k}} f(\xi_{\mathbf{k}}) &= k_{\text{B}} T \ln [1 + e^{-\mu/k_{\text{B}} T}] = k_{\text{B}} T \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{n} e^{-n\mu/k_{\text{B}} T} \\ &= k_{\text{B}} T \cdot O[e^{-\mu/k_{\text{B}} T}] \end{aligned}$$

ist das Integral *III* exponentiell klein und kann daher vernachlässigt werden. Wir können weiter für $\xi_{\mathbf{k}} \ll \mu$ eine Taylor-Entwicklung durchführen

$$C(\mu + \xi_{\mathbf{k}}) - C(\mu - \xi_{\mathbf{k}}) = 2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\xi_{\mathbf{k}}^{2n+1}}{(2n+1)!} \left\{ \frac{d^{2n+1} C(\epsilon_{\mathbf{k}})}{d\epsilon_{\mathbf{k}}^{2n+1}} \right\}_{\epsilon_{\mathbf{k}}=\mu}$$

und erhalten

$$\begin{aligned} \int_0^{\mu} d\xi_{\mathbf{k}} [C(\mu + \xi_{\mathbf{k}}) - C(\mu - \xi_{\mathbf{k}})] f(\xi_{\mathbf{k}}) = \\ 2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)!} \left. \frac{d^{2n+1} C(\epsilon_{\mathbf{k}})}{d\epsilon_{\mathbf{k}}^{2n+1}} \right|_{\epsilon_{\mathbf{k}}=\mu} \int_0^{\mu} d\xi_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}}^{2n+1} f(\xi_{\mathbf{k}}). \end{aligned} \quad (\text{A7.11.4})$$

Mit der Abkürzung $x = \xi_{\mathbf{k}}/k_{\text{B}} T$ erhalten wir dann

$$\begin{aligned} \int_0^{\mu} d\xi_{\mathbf{k}} [C(\mu + \xi_{\mathbf{k}}) - C(\mu - \xi_{\mathbf{k}})] f(\xi_{\mathbf{k}}) = \\ 2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(k_{\text{B}} T)^{2n+2}}{(2n+1)!} \left. \frac{d^{2n+1} C(\epsilon_{\mathbf{k}})}{d\epsilon_{\mathbf{k}}^{2n+1}} \right|_{\epsilon_{\mathbf{k}}=\mu} \underbrace{\int_0^{\mu/k_{\text{B}} T} dx \frac{x^{2n+1}}{e^x + 1}}_{B_{2n+1}(T)}. \end{aligned} \quad (\text{A7.11.5})$$

Für $A(T)$ erhalten wir damit das allgemeine Ergebnis

$$A(T) = \int_0^{\mu} d\epsilon_{\mathbf{k}} D(\epsilon_{\mathbf{k}}) a(\epsilon_{\mathbf{k}}) + 2 \sum_{n=0}^{\infty} B_{2n+1} \frac{(k_{\text{B}} T)^{2n+2}}{(2n+1)!} \left. \frac{d^{2n+1} C(\epsilon_{\mathbf{k}})}{d\epsilon_{\mathbf{k}}^{2n+1}} \right|_{\epsilon_{\mathbf{k}}=\mu}. \quad (\text{A7.11.6})$$

Hierbei entspricht das erste Integral auf der rechten Seite der Größe $A(T=0)$. Mit

$$\lim_{T \rightarrow 0} B_{2n+1}(T) = \int_0^{\infty} \frac{dx x^{2n+1}}{e^x + 1}, \quad B_1 = \frac{\pi^2}{12}, \quad B_3 = \frac{7\pi^4}{120}, \quad \dots \quad (\text{A7.11.7})$$

folgt für die Korrektur in führender Ordnung

$$A(T) = \int_0^{\mu} d\epsilon_{\mathbf{k}} D(\epsilon_{\mathbf{k}}) a(\epsilon_{\mathbf{k}}) + \frac{(\pi k_{\text{B}} T)^2}{6} \left. \frac{d[D(\epsilon_{\mathbf{k}}) a(\epsilon_{\mathbf{k}})]}{d\epsilon_{\mathbf{k}}} \right|_{\epsilon_{\mathbf{k}}=\mu}. \quad (\text{A7.11.8})$$

Mit der Abkürzung $C(\epsilon_k) = D(\epsilon_k)a(\epsilon_k)$ erhalten wir für die Größe $B(T) = \int_0^\infty d\epsilon_k C(\epsilon_k) \left(-\frac{\partial f(\epsilon_k)}{\partial \epsilon_k}\right)$

$$B(T) = \frac{1}{4k_B T} \int_0^\infty d\epsilon_k \frac{C(\epsilon_k)}{\cosh^2 \frac{\epsilon_k - \mu}{2k_B T}} \underset{\epsilon_k = \mu + \xi_k}{=} \frac{1}{4k_B T} \int_{-\mu}^\infty d\xi_k \frac{C(\mu + \xi_k)}{\cosh^2 \frac{\xi_k}{2k_B T}}. \quad (\text{A7.11.9})$$

Eine Taylor-Entwicklung von $C(\epsilon_k)$ an der Fermi-Kante ergibt

$$C(\mu + \xi_k) = C(\mu) + \frac{\xi_k}{1!} \left. \frac{\partial C}{\partial \epsilon_k} \right|_{\epsilon_k = \mu} + \frac{\xi_k^2}{2!} \left. \frac{\partial^2 C}{\partial \epsilon_k^2} \right|_{\epsilon_k = \mu} + \dots \quad (\text{A7.11.10})$$

Setzen wir diese Entwicklung in (A7.11.9) ein, so erhalten wir unter Verwendung der Abkürzung $x = \xi_k/2k_B T$

$$\begin{aligned} B(T) &= C(\mu) + \frac{1}{2!} \left. \frac{\partial^2 C}{\partial \epsilon_k^2} \right|_{\epsilon_k = \mu} \frac{1}{4k_B T} \int_{-\mu}^\infty d\xi_k \frac{\xi_k^2}{\cosh^2 \frac{\xi_k}{2k_B T}} + \dots \\ &= C(\mu) + \frac{1}{2!} \left. \frac{\partial^2 C}{\partial \epsilon_k^2} \right|_{\epsilon_k = \mu} \frac{(2k_B T)^2}{2} \int_{-\mu/2k_B T}^\infty dx \frac{x^2}{\cosh^2 x} + \dots \end{aligned} \quad (\text{A7.11.11})$$

Für $T \rightarrow 0$ können wir $\int_{-\mu/2k_B T}^\infty = \int_{-\infty}^\infty = 2 \int_0^\infty$ verwenden und erhalten schließlich

$$\begin{aligned} B(T) &= C(\mu) + \frac{(2k_B T)^2}{2!} \left\{ \left. \frac{\partial^2 C}{\partial \epsilon_k^2} \right\}_{\epsilon_k = \mu} \underbrace{\int_0^\infty dx \frac{x^2}{\cosh^2 x}}_{\pi^2/12} + \dots \\ &= C(\mu) + \frac{(\pi k_B T)^2}{6} \left\{ \left. \frac{\partial^2 C}{\partial \epsilon_k^2} \right\}_{\epsilon_k = \mu} \right. + \dots \end{aligned} \quad (\text{A7.11.12})$$



A7.12 Temperaturabhängigkeit des chemischen Potentials

Wenden Sie das Resultat von Aufgabe A7.11 auf den Spezialfall $a(\epsilon_k) = 1$, d. h. auf die Berechnung der gesamten Teilchendichte $A = n = N/V$ an und zeigen Sie, dass für die Temperaturabhängigkeit des chemischen Potentials $\mu(T)$ gilt

$$\mu(T) = \mu(0) \left[1 - \frac{1}{12} \left(\frac{\pi k_B T}{\mu(0)} \right)^2 + \dots \right]$$

gilt.

Lösung

Wir behandeln den Spezialfall $a(\epsilon_k) = 1$ von Gleichung (A7.11.8). In diesem Fall gilt $C(\epsilon_k) = D(\epsilon_k)$ und wir erhalten

$$N = \underbrace{\int_0^\mu d\epsilon_k D(\epsilon_k)}_I + \frac{(\pi k_B T)^2}{6} \underbrace{\left\{ \left. \frac{dD(\epsilon_k)}{d\epsilon_k} \right\}_{\epsilon_k = \mu}}_{II}. \quad (\text{A7.12.1})$$

Für die beiden Beiträge I und II erhalten wir

$$I = \underbrace{\frac{m}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{2m}}_{D_0} \int_0^\mu d\epsilon_{\mathbf{k}} \sqrt{\epsilon_{\mathbf{k}}} = \frac{2}{3} D_0 \mu^{3/2} \quad (\text{A7.12.2})$$

$$II = D_0 \left\{ \frac{d\sqrt{\epsilon_{\mathbf{k}}}}{d\epsilon_{\mathbf{k}}} \right\}_{\epsilon_{\mathbf{k}}=\mu} = \frac{1}{2} \frac{D_0}{\sqrt{\mu}} = \frac{1}{2} \frac{D_0}{\mu^2} \mu^{3/2}, \quad (\text{A7.12.3})$$

wobei

$$D_0 = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2}$$

ist. Damit ergibt sich

$$\begin{aligned} N &= D_0 \mu^{3/2} \left[\frac{2}{3} + \frac{1}{12} \left(\frac{\pi k_B T}{\mu} \right)^2 \right] \\ &= \frac{2}{3} D_0 \mu^{3/2} \left[1 + \frac{1}{8} \left(\frac{\pi k_B T}{\mu} \right)^2 \right] \equiv \frac{2}{3} D_0 \mu_0^{3/2}, \quad \mu_0 = \mu(0) \end{aligned} \quad (\text{A7.12.4})$$

und somit³

$$\mu^{3/2} = \frac{\mu_0^{3/2}}{1 + \frac{1}{8} \left(\frac{\pi k_B T}{\mu} \right)^2} \simeq \mu_0^{3/2} \left[1 - \frac{1}{8} \left(\frac{\pi k_B T}{\mu_0} \right)^2 \right]. \quad (\text{A7.12.5})$$

Daraus erhalten wir schließlich⁴

$$\mu(T) = \mu_0 \left[1 - \frac{2}{3} \frac{1}{8} \left(\frac{\pi k_B T}{\mu_0} \right)^2 \right] = \mu_0 \left[1 - \frac{1}{12} \left(\frac{\pi k_B T}{\mu(0)} \right)^2 \right]. \quad (\text{A7.12.6})$$

³ Wir benutzen

$$\frac{1}{1+x} = 1 - x + x^2 - \dots$$

⁴ Wir benutzen

$$(1-x)^{2/3} = 1 - \frac{2}{3}x - \frac{1}{9}x^2 - \frac{4}{81}x^3 - \dots$$

