

9 Dynamik von Kristallelektronen

A9.1 Maxwell-Gleichungen



Leiten Sie aus den Maxwell-Gleichungen der Elektrodynamik für Ladungsträger mit Ladung q , der Dichte ρ_q und der Stromdichte \mathbf{J}_q die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial \rho_q(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J}_q(\mathbf{r}, t) = 0$$

und die Magnetfeld-Abschirmgleichung

$$\left[\nabla^2 - \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right] \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = -\mu_0 \nabla \times \mathbf{J}_q(\mathbf{r}, t)$$

ab.

Lösung

Zur Lösung der Aufgabe gehen wir von den Maxwell-Gleichungen der Elektrodynamik aus (vergleiche hierzu auch Aufgabe A7.7). Sie lauten in SI-Einheiten ($\epsilon = \mu = 1$)

$$\nabla \times \mathbf{H} = \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} + \mathbf{J}_q, \quad \mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E} \quad (\text{A9.1.1})$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H} \quad (\text{A9.1.2})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (\text{A9.1.3})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho_q. \quad (\text{A9.1.4})$$

Hierbei ist ρ_q die Ladungsdichte und \mathbf{J}_q die elektrische Stromdichte. Für Elektronen in Metallen gilt: $q = -e$, $\rho_q = -en$, $n = N/V$.

Wir bilden nun die Divergenz von Gleichung (A9.1.1) und erhalten

$$\underbrace{\nabla \cdot (\nabla \times \mathbf{H})}_{=0} = \frac{\partial}{\partial t} \nabla \cdot \mathbf{D} + \nabla \cdot \mathbf{J}_q \quad (\text{A9.1.5})$$

und erhalten die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial \rho_q}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J}_q = 0 \quad (\text{A9.1.6})$$

für die Ladungsdichte ρ_q .

Wir bilden nun die Rotation von Gleichung (A9.1.1) ($\nabla \times \dots$) und erhalten dadurch

$$\begin{aligned}
 \nabla \times (\nabla \times \mathbf{H}) &= -\nabla^2 \mathbf{H} + \underbrace{\nabla (\nabla \cdot \mathbf{H})}_{=0} = -\nabla^2 \mathbf{H} \\
 -\nabla^2 \mathbf{H} &= \frac{\partial}{\partial t} \nabla \times \mathbf{D} + \nabla \times \mathbf{J}_q \\
 &= \epsilon_0 \frac{\partial}{\partial t} \nabla \times \mathbf{E} + \nabla \times \mathbf{J}_q \\
 &\stackrel{(A9.1.2)}{=} -\epsilon_0 \frac{\partial^2 \mathbf{B}}{\partial t^2} + \nabla \times \mathbf{J}_q \\
 &= -\mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial^2 \mathbf{H}}{\partial t^2} + \nabla \times \mathbf{J}_q .
 \end{aligned} \tag{A9.1.7}$$

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

$$\left[\nabla^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right] \mathbf{B} = -\mu_0 \nabla \times \mathbf{J}_q , \tag{A9.1.8}$$

die wir als Magnetfeldabschirmgleichung interpretieren können.



A9.2 Elektromagnetische Skin-Tiefe im Drude-Modell

Für Elektronen in Metallen ($q = -e$, $\rho_q = -en$, $n = N/V$, $\mathbf{J}_q = \mathbf{J}_e$) gelte das Drude-Gesetz für die lineare Antwort der elektrischen Stromdichte auf ein elektrisches Feld $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_0(\mathbf{r}, t)e^{-i\omega t}$ mit harmonischer Zeitabhängigkeit (vergleiche hierzu Aufgabe A7.7):

$$\mathbf{J}_q = \sigma(\omega) \mathbf{E} , \quad \sigma(\omega) = \frac{ne^2}{m} \frac{1}{-i\omega + 1/\tau} .$$

(a) Zeigen Sie, dass die Magnetfeld-Abschirmgleichung für diesen Fall

$$\left[\nabla^2 + \mu_0 \epsilon_0 \omega^2 \right] \mathbf{B} = \frac{\mathbf{B}}{\delta^2(\omega)}$$

lautet, wobei $\delta(\omega)$ die elektromagnetische Skin-Tiefe ist.

(b) Diskutieren Sie den (i) hydrodynamischen Grenzfall $\omega \ll 1/\tau$ und (ii) den stoßlosen Grenzfall $\omega \gg 1/\tau$.

Lösung

Zur Lösung der Aufgabe gehen wir wieder von den Maxwell-Gleichungen der Elektrodynamik aus (vergleiche Aufgabe A9.1). Die Maxwell-Gleichungen werden ergänzt durch die konstitutive Relation

$$\mathbf{J}_q = \sigma(\omega) \mathbf{E} , \quad \sigma(\omega) = \frac{ne^2}{m} \frac{1}{-i\omega + 1/\tau} , \tag{A9.2.1}$$

welche die elektrische Stromdichte \mathbf{J}_q mit der elektrischen Feldstärke \mathbf{E} über die elektronische Leitfähigkeit σ verknüpft.

(a) Bilden wir die Rotation von Gleichung (A9.1.1) ($\nabla \times \dots$), so erhalten wir

$$\begin{aligned}
 \nabla \times (\nabla \times \mathbf{H}) &= -\nabla^2 \mathbf{H} + \underbrace{\nabla (\nabla \cdot \mathbf{H})}_{=0} = -\nabla^2 \mathbf{H} \\
 -\nabla^2 \mathbf{H} &= \frac{\partial}{\partial t} \nabla \times \mathbf{D} + \nabla \times \mathbf{J}_q \\
 &= \epsilon_0 \frac{\partial}{\partial t} \nabla \times \mathbf{E} + \nabla \times \mathbf{J}_q \\
 &\stackrel{(A9.1.2)}{=} -\epsilon_0 \frac{\partial^2 \mathbf{B}}{\partial t^2} + \nabla \times \mathbf{J}_q \\
 &= -\mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial^2 \mathbf{H}}{\partial t^2} + \nabla \times \mathbf{J}_q
 \end{aligned} \tag{A9.2.2}$$

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

$$\left[\nabla^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right] \mathbf{B} = -\mu_0 \nabla \times \mathbf{J}_q. \tag{A9.2.3}$$

Einsetzen von $\mathbf{J}_q = \sigma(\omega) \mathbf{E}$ in Gleichung (A9.2.3) liefert

$$\left[\nabla^2 + \frac{\omega^2}{c^2} \right] \mathbf{B} = -\mu_0 \nabla \times \mathbf{J}_q = -\mu_0 \sigma(\omega) \nabla \times \mathbf{E} = \underbrace{-i\omega \sigma(\omega) \mu_0}_{=1/\delta^2(\omega)} \mathbf{B}. \tag{A9.2.4}$$

Wir erhalten also die Magnetfeld-Abschirmgleichung

$$\left[\nabla^2 + \frac{\omega^2}{c^2} \right] \mathbf{B} = \frac{\mathbf{B}}{\delta^2(\omega)} \tag{A9.2.5}$$

mit der Magnetfeld-Eindringtiefe (Skin-Tiefe)

$$\delta^2(\omega) = \frac{1}{-i\omega \sigma(\omega) \mu_0} = \underbrace{\frac{m}{\mu_0 n e^2}}_{=\delta_\infty^2} \frac{1 - i\omega\tau}{-i\omega\tau} = \delta_\infty^2 \frac{1 - i\omega\tau}{-i\omega\tau}. \tag{A9.2.6}$$

(b) Im stoßlosen Grenzfall ($\omega\tau \gg 1$) erhalten wir

$$\delta^2(\omega) = \frac{m}{\mu_0 n e^2} = \delta_\infty^2. \tag{A9.2.7}$$

Man beachte, dass die Skin-Tiefe δ_∞ in diesem Fall mit Hilfe von $\mu_0 \epsilon_0 = 1/c^2$ durch die Plasmafrequenz ω_p ausgedrückt werden kann:

$$\delta_\infty^2 = c^2 \frac{\epsilon_0 m}{\mu_0 n e^2} = \frac{c^2}{\omega_p^2}. \tag{A9.2.8}$$

Im hydrodynamischen Limes ($\omega\tau \ll 1$) erhalten wir

$$\delta^2(\omega) = \frac{m}{\mu_0 n e^2} \frac{1}{\omega\tau} = \delta_\infty^2 \frac{1}{\omega\tau}. \tag{A9.2.9}$$

Die Magnetfeldabschirmlänge nimmt also proportional zu $1/\sqrt{\omega}$ mit zunehmender Frequenz ab.



A9.3 Elektrische und thermische Leitfähigkeit

In einem Au-Draht nimmt der spezifische Widerstand von $\rho = 3 \mu\Omega\text{m}$ bei Raumtemperatur auf $\rho = 1 \times 10^{-3} \mu\Omega\text{m}$ bei 4 K ab. Bei einem Draht aus einer AuPd-Legierung (50/50) wird ein in etwa temperaturunabhängiger spezifischer Widerstand von $\rho = 50 \mu\Omega\text{m}$ gemessen.

- Berechnen Sie die mittlere freie Weglänge der Elektronen in den beiden Proben bei Raumtemperatur und 4 K ($k_F = 1.2 \times 10^{10} \text{ m}^{-1}$, $m^* = 1.1 m_e$).
- Welche Streuprozesse dominieren bei welcher Temperatur in den beiden Proben?
- Schätzen Sie die Wärmeleitfähigkeit der beiden Proben bei einer Temperatur von 4 K ab.

Lösung

Zur Lösung der Aufgabe nehmen wir an, dass die Fermi-Wellenzahl für die reine Au-Probe und die AuPd-Legierung gleich sind. Aus der angegebenen Fermi-Wellenzahl $k_F = (3\pi^2 n)^{1/3} = 1.2 \times 10^{10} \text{ m}^{-1}$ können wir die Ladungsträgerdichte bestimmen zu

$$n = \frac{k_F^3}{3\pi^2} = \frac{(1.2 \times 10^{10})^3}{3\pi^2} \text{ m}^{-3} = 5.84 \times 10^{28} \text{ m}^{-3}. \quad (\text{A9.3.1})$$

Mit der effektiven Masse $m^* = 1.1 m$ ergibt sich daraus die Fermi-Geschwindigkeit

$$v_F = \frac{\hbar k_F}{m^*} = \frac{1.05 \times 10^{-34} \cdot 1.2 \times 10^{10}}{1.1 \cdot 9.1 \times 10^{-31}} \text{ m/s} = 1.26 \times 10^6 \text{ m/s}. \quad (\text{A9.3.2})$$

- Die mittlere freie Weglänge ℓ bestimmen wir aus der Drude-Leitfähigkeit

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m^*} = \frac{ne^2\ell}{m^*v_F} \quad (\text{A9.3.3})$$

unter Verwendung von $\sigma = 1/\rho$ (dies ist für polykristalline Materialien eine gute Näherung) zu

$$\ell = \frac{m^*v_F}{ne^2\rho}. \quad (\text{A9.3.4})$$

Einsetzen der angegebenen Werte liefert

$$\begin{aligned} \text{Au: } \ell(300 \text{ K}) &= 2.8 \times 10^{-8} \text{ m}, & \ell(4 \text{ K}) &= 8.4 \times 10^{-5} \text{ m} \\ \text{AuPd: } \ell(300 \text{ K}) &\simeq \ell(4 \text{ K}) = 1.7 \times 10^{-9} \text{ m}. \end{aligned}$$

- In der reinen Au-Probe dominiert bei Raumtemperatur die Streuung an Phononen. Da diese mit abnehmender Temperatur ausfrieren, nimmt der spezifische Widerstand dieser Probe stark ab. Bei 4 K beträgt die mittlere freie Weglänge fast $100 \mu\text{m}$. Falls der Drahtdurchmesser in dieser Größenordnung sein sollte, kann in sehr reinen Proben bei dieser Temperatur bereits die Streuung an der Probenoberfläche eine dominierende Rolle spielen. Für größere Drahtdurchmesser dominiert je nach Reinheit der Probe

entweder die Streuung an Defekten und Verunreinigungen oder die Streuung an Phononen. Der Streuquerschnitt für die Elektron-Elektron-Streuung skaliert proportional zu $(T/T_F)^2$ und ist wegen der hohen Fermi-Temperatur (etwa 100 000 K) um etwa den Faktor 10^{-10} geringer als derjenige für die Elektron-Verunreinigungsstreuung. Elektron-Elektron-Streuung spielt bei tiefen Temperaturen also nur in hochreinen Proben eine dominierende Rolle.

In der AuPd-Probe spielen die Pd-Atome die Rolle von Verunreinigungen. Die mittlere freie Weglänge ist deshalb sehr kurz und liegt mit etwa 2 nm im Bereich der Atomabstände. Bei dieser Probe dominiert deshalb im gesamten Temperaturbereich die Elektron-Verunreinigungsstreuung, was zu einem fast temperaturunabhängigen spezifischen Widerstand führt.

- (c) Da die Phononen stark durch die Elektronen gestreut werden, ist die phononische Wärmeleitfähigkeit in Metallen im Vergleich zu Isolatoren klein. In Metallen überwiegt deshalb üblicherweise die elektronische Wärmeleitfähigkeit deutlich. Mit Hilfe des Wiedemann-Franz Gesetzes erhalten wir für die elektronische Wärmeleitfähigkeit

$$\kappa = L T \frac{1}{\rho}, \quad L = 2.44 \times 10^{-8} \text{ W}\Omega/\text{K}^2, \quad (\text{A9.3.5})$$

wobei L die Lorenz-Zahl ist.

Da in der reinen Au-Probe der spezifische Widerstand mit der Temperatur stark (üblicherweise stärker als linear in T) abnimmt, erwarten wir, dass die Wärmeleitfähigkeit dieser Probe mit sinkender Temperatur zunimmt. Bei genügend tiefen Temperaturen dominiert dann die Verunreinigungsstreuung und wir erhalten hier $\rho \simeq \text{const}$. Die Wärmeleitfähigkeit κ nimmt entsprechend in diesem Temperaturbereich mit sinkender Temperatur proportional zu T ab.

In der AuPd-Probe ist $\rho(T) \simeq \text{const}$ und wir erwarten nach (A9.3.5) eine etwa lineare Abnahmen von κ mit sinkender Temperatur. Allerdings kann in stark verunreinigten Proben und Legierungen die elektronische Wärmeleitfähigkeit so stark unterdrückt sein, dass hier die Gesamtwärmeleitfähigkeit durch die phononische Wärmeleitfähigkeit dominiert wird. Auch in diesem Fall erwarten wir eine Abnahme von κ mit T .

A9.4 Linearisierte Boltzmann-Transportgleichung



Leiten Sie die linearisierte Boltzmann-Transportgleichung für Elektronen in Metallen ab. Gehen Sie bei der Herleitung von den (Nichtgleichgewichts-) Phasenraum-Verteilungsfunktionen

$$f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) = f(\hbar \mathbf{k}, \mathbf{r}, t)$$

$$\epsilon_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) = \epsilon(\hbar \mathbf{k}, \mathbf{r}, t)$$

aus.

Lösung

Das totale Differential von $f_{\mathbf{k}}$ lautet (wir verwenden $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$):

$$\begin{aligned} df &= \frac{\partial f}{\partial t} dt + (\nabla_{\mathbf{r}} f) \cdot d\mathbf{r} + (\nabla_{\mathbf{p}} f) \cdot d\mathbf{p} \\ \frac{df}{dt} &= \frac{\partial f}{\partial t} + (\nabla_{\mathbf{r}} f) \cdot \frac{d\mathbf{r}}{dt} + (\nabla_{\mathbf{p}} f) \cdot \frac{d\mathbf{p}}{dt}. \end{aligned} \quad (\text{A9.4.1})$$

Im quasi-klassischen Limes gelten die Hamilton-Bewegungsgleichungen ($\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$)

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \nabla_{\mathbf{p}} \epsilon = \mathbf{v}_{\mathbf{p}} \quad (\text{A9.4.2})$$

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = -\nabla_{\mathbf{r}} \epsilon \quad (\text{A9.4.3})$$

Daraus ergibt sich die kinetische Gleichung

$$\frac{\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial t} + \mathbf{v}_{\mathbf{p}} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f_{\mathbf{k}} - (\nabla_{\mathbf{p}} f_{\mathbf{k}}) \cdot (\nabla_{\mathbf{r}} \epsilon_{\mathbf{k}}) = I_{\mathbf{k}}. \quad (\text{A9.4.4})$$

Die Linearisierung dieser Gleichung mit

$$f_{\mathbf{k}} = f_{\mathbf{k}}^0 + \delta f_{\mathbf{k}}, \quad \nabla_{\mathbf{r}} f_{\mathbf{k}} = \nabla_{\mathbf{r}} \delta f_{\mathbf{k}}, \quad \nabla_{\mathbf{p}} f_{\mathbf{k}} \simeq \frac{\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}} \nabla_{\mathbf{p}} \epsilon_{\mathbf{k}} = \mathbf{v}_{\mathbf{p}} \frac{\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}} \quad (\text{A9.4.5})$$

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}}^0 + \delta \epsilon_{\mathbf{k}}, \quad \nabla_{\mathbf{r}} \epsilon_{\mathbf{k}} = \nabla_{\mathbf{r}} \delta \epsilon_{\mathbf{k}} \quad (\text{A9.4.6})$$

führt auf

$$\frac{\partial \delta f_{\mathbf{k}}}{\partial t} + \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \left[\delta f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) - \frac{\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}} \delta \epsilon_{\mathbf{k}} \right] = \delta I_{\mathbf{k}}. \quad (\text{A9.4.7})$$

Hierbei haben wir $\mathbf{v}_{\mathbf{p}} = \nabla_{\mathbf{p}} \epsilon = \nabla_{\mathbf{k}} \epsilon / \hbar = \mathbf{v}_{\mathbf{k}}$ verwendet.

**A9.5 Teilchen-, Ladungs-, Energie-, Entropie- und Wärmestrom**

Diskutieren Sie den Teilchen-, Ladungs-, Energie-, Entropie- und Wärmestrom in einem Festkörper im Rahmen der Boltzmann-Transporttheorie.

Lösung

Wir wollen die verschiedenen Ströme aus der Boltzmann-Gleichung für freie Ladungsträger mit Ladung q (für Elektronen gilt $q = -e$), welche für die linearisierte Phasenraum-Verteilungsfunktion $\delta f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)$ wie folgt lautet [vergleiche Gleichung (A9.4.7) in Aufgabe A9.4]

$$\frac{\partial}{\partial t} \delta f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) + \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \nabla \left[\delta f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) - \frac{\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}} \delta \epsilon_{\mathbf{k}} \right] = \delta I_{\mathbf{k}}. \quad (\text{A9.5.1})$$

Hierbei ist $\mathbf{v}_k = \partial \epsilon_k / \partial \hbar \mathbf{k}$ die Gruppengeschwindigkeit der Elektronen und δI_k das sogenannte Stoßintegral. Für Letzteres verwenden wir die Relaxationszeitznäherung

$$\delta I_k = -\frac{1}{\tau} [\delta f_k - \delta f_k^{\text{loc}}] . \quad (\text{A9.5.2})$$

Hierbei ist $\delta f_k = f_k - f_k^0$, τ eine gemittelte Stoßzeit und

$$\begin{aligned} \delta f_k^{\text{loc}} &= f_k^{\text{loc}} - f_k^0 = \frac{1}{\exp\left(\frac{(\epsilon_k + \delta \epsilon_k) - (\mu + \delta \mu)}{k_B(T + \delta T)}\right) + 1} - f_k^0 \\ &\stackrel{\text{Taylor}}{=} \frac{\partial f_k}{\partial \epsilon_k} \left[\delta \epsilon_k - \delta \mu - \frac{\xi_k}{T} \delta T \right] \\ &= - \underbrace{\frac{1}{4k_B T \cosh^2 \frac{\xi_k}{2k_B T}}}_{\varphi_k} \left[\delta \epsilon_k - \delta \mu - \frac{\xi_k}{T} \delta T \right] \end{aligned} \quad (\text{A9.5.3})$$

eine Verteilungsfunktion, welche lokale äußere Störungen durch die beiden elektromagnetischen Potenziale $\phi(\mathbf{r}, t)$ (skalar) und $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ (vektoriell)¹

$$\delta \epsilon_k = q\phi(\mathbf{r}, t) + q\mathbf{v}_k \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \quad (\text{A9.5.4})$$

sowie Effekte der lokalen Änderung der Temperatur $\delta T(\mathbf{r}, t)$ und des chemischen Potentials $\delta \mu(\mathbf{r}, t)$ enthält. Hierbei ist $\xi_k = \epsilon_k - \mu$ die Energie bezogen auf das chemische Potenzial μ . Für den Fall einer sphärischen Fermi-Fläche sind zwei Summen über die Funktion φ_k wichtig:

$$\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varphi_k = N_F \quad (\text{A9.5.5})$$

$$\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varphi_k v_{ki} v_{kj} = \frac{n}{m} \delta_{ij} . \quad (\text{A9.5.6})$$

Hierbei ist $N_F = D(E_F)/V$ die Zustandsdichte bei der Fermi-Energie und $n = N/V$ die Teilchendichte.

Die für ein System aus Fermionen relevanten physikalischen Größen sind:

1. Teilchendichte:

$$\begin{aligned} \delta n(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \delta f_k(\mathbf{r}, t) \\ &\stackrel{\text{lokal}}{=} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varphi_k [\delta \mu(\mathbf{r}, t) - q\phi(\mathbf{r}, t)] \\ &= N_F [\delta \mu(\mathbf{r}, t) - q\phi(\mathbf{r}, t)] . \end{aligned} \quad (\text{A9.5.7})$$

¹ Es gilt $\nabla_r \delta \epsilon = q(\nabla_r \phi + \partial \mathbf{A} / \partial t) = -q\mathbf{E}$ mit der eichinvarianten Form der elektrischen Feldstärke $\mathbf{E} = -\nabla_r \phi - \partial \mathbf{A} / \partial t$.

2. *Ladungsdichte:*

$$\delta\rho_q(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} q \delta f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) = q \delta n(\mathbf{r}, t). \quad (\text{A9.5.8})$$

3. *Energiedichte:*

$$\delta\varepsilon(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} \delta f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) = \mu \delta n(\mathbf{r}, t) + T \delta\sigma(\mathbf{r}, t). \quad (\text{A9.5.9})$$

4. *Entropiedichte:*

$$\begin{aligned} T \delta\sigma(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \xi_{\mathbf{k}} \delta f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) \\ &\stackrel{\text{lokal}}{=} \underbrace{\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varphi_{\mathbf{k}} \frac{\xi_{\mathbf{k}}^2}{T}}_{c_V(T)} \delta T(\mathbf{r}, t) = c_V(T) \delta T(\mathbf{r}, t). \end{aligned} \quad (\text{A9.5.10})$$

Die hierzu korrespondierenden Stromdichten erhalten wir durch die Ableitung der Erhaltungssätze für Teilchenzahl, Ladung und Energie aus der Boltzmann-Transportgleichung (A9.5.1) zu

1. *Teilchenstromdichte:*

$$\begin{aligned} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \delta I_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) &= \frac{\partial}{\partial t} \delta n(\mathbf{r}, t) + \nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) \\ \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \left[\delta f_{\mathbf{k}} - \frac{\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}} \delta \epsilon_{\mathbf{k}} \right]. \end{aligned} \quad (\text{A9.5.11})$$

2. *Ladungsstromdichte:*

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_q(\mathbf{r}, t) &= q \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} q \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \left[\delta f_{\mathbf{k}} - \frac{\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}} \delta \epsilon_{\mathbf{k}} \right] \\ &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} q \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \delta f_{\mathbf{k}} - \frac{n e^2}{m} \mathbf{A}. \end{aligned} \quad (\text{A9.5.12})$$

Die letzte Gleichheit gilt hierbei für eine sphärische Fermi-Fläche.

3. *Energiestromdichte:*

$$\begin{aligned} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} \delta I_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) &= \frac{\partial}{\partial t} \delta \varepsilon(\mathbf{r}, t) + \nabla \cdot \mathbf{J}_{\varepsilon}(\mathbf{r}, t) \\ \mathbf{J}_{\varepsilon}(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \left[\delta f_{\mathbf{k}} - \frac{\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}} \delta \epsilon_{\mathbf{k}} \right] = \mu \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) + T \mathbf{J}_{\sigma}(\mathbf{r}, t). \end{aligned} \quad (\text{A9.5.13})$$

4. *Entropiestromdichte:*

$$\mathbf{J}_{\sigma}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{T} \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \left[\delta f_{\mathbf{k}} - \frac{\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}} \delta \epsilon_{\mathbf{k}} \right] = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{T} \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \delta f_{\mathbf{k}}. \quad (\text{A9.5.14})$$

5. *Wärmestromdichte:*

$$\begin{aligned}
 \mathbf{J}_h(\mathbf{r}, t) &= T \mathbf{J}_\sigma(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \xi_{\mathbf{k}} \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \left[\delta f_{\mathbf{k}} - \frac{\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}} \delta \epsilon_{\mathbf{k}} \right] \\
 &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \xi_{\mathbf{k}} \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \delta f_{\mathbf{k}} .
 \end{aligned} \tag{A9.5.15}$$

Wir haben oben immer angenommen, dass die Beiträge vom Stoßintegral $\delta I_{\mathbf{k}}$ zu den Kontinuitätsgleichungen für die Dichten der Teilchenzahl, Ladung und Energie verschwinden. Aus der expliziten Form des Stoßintegrals

$$\delta I_{\mathbf{k}} = -\frac{1}{\tau} \left\{ \delta f_{\mathbf{k}} - \varphi_{\mathbf{k}} \left[q \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{A} + \frac{\delta n}{N_F} + \xi_{\mathbf{k}} \frac{\delta \sigma}{c_V} \right] \right\} \tag{A9.5.16}$$

erhalten wir im Einzelnen:

1. *Teilchenzahl- und Ladungserhaltung:*

$$\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \delta I_{\mathbf{k}} = -\frac{1}{\tau} \{ \delta n - N_F [\delta \mu - q \phi] \} = 0 . \tag{A9.5.17}$$

2. *Energieerhaltung:*

$$\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \xi_{\mathbf{k}} \delta I_{\mathbf{k}} = -\frac{1}{\tau} \{ T \delta \sigma - c_V \delta T \} = 0 . \tag{A9.5.18}$$

Zur Beschreibung des Transports von Impuls (elektrische Leitfähigkeit) und Energie (Wärmeleitfähigkeit) müssen wir eine Gradientenentwicklung in der Boltzmann-Gleichung (A9.5.1) durchführen. Zu diesem Zweck ist es günstig, zu einer neuen Verteilungsfunktion $\delta g_{\mathbf{k}}$ überzugehen, die definiert ist durch

$$\delta g_{\mathbf{k}} = \delta f_{\mathbf{k}} - \varphi_{\mathbf{k}} \left[q \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{A} + \frac{\delta n}{N_F} + \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{T} \delta T \right] . \tag{A9.5.19}$$

Man beachte, dass die Beschreibung durch $\delta g_{\mathbf{k}}$ die erhaltenen Observablen herausprojiziert und sich somit auf die relevanten dissipativen Ströme konzentriert, die sich wie folgt durch $\delta g_{\mathbf{k}}$ ausdrücken lassen:

$$\mathbf{J}_q = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} q \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \delta g_{\mathbf{k}} \tag{A9.5.20}$$

$$\mathbf{J}_\sigma = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{T} \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \delta g_{\mathbf{k}} . \tag{A9.5.21}$$

Die Boltzmann-Gleichung für $\delta g_{\mathbf{k}}$ lautet

$$\begin{aligned}
 \left[\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \nabla \right] \delta g_{\mathbf{k}} + \varphi_{\mathbf{k}} \frac{\partial}{\partial t} \left[q \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{A} + \frac{\delta n}{N_F} + \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{T} \delta T \right] \\
 + \varphi_{\mathbf{k}} \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \nabla \left[q \phi + \frac{\delta n}{N_F} + \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{T} \delta T \right] = -\frac{\delta g_{\mathbf{k}}}{\tau} .
 \end{aligned} \tag{A9.5.22}$$

Wir erkennen, dass die durchgeführte Transformation zu einer eichinvarianten Form der elektrischen Feldstärke

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\nabla\phi(\mathbf{r}, t) - \frac{\partial\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \quad (\text{A9.5.23})$$

führt, die als Kraftterm in der Boltzmann-Gleichung auftritt:

$$\begin{aligned} & \left[\frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{\tau} + \mathbf{v}_k \cdot \nabla \right] \delta g_k + \varphi_k \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{\delta n}{N_F} + \frac{\xi_k}{T} \delta T \right] \\ &= \varphi_k \mathbf{v}_k \cdot \left[q\mathbf{E} - \nabla \frac{\delta n}{N_F} - \frac{\xi_k}{T} \nabla \delta T \right]. \end{aligned} \quad (\text{A9.5.24})$$

Vernachlässigen wir in dieser Gleichung höhere Ordnungen in $\tau(\partial/\partial t)$ und in den Gradienten $\tau\mathbf{v}_k \cdot \nabla$, so ergibt sich die Transportgleichung

$$\delta g_k = \tau \varphi_k \mathbf{v}_k \cdot \left[q\mathbf{E} - \nabla \frac{\delta n}{N_F} - \frac{\xi_k}{T} \nabla \delta T \right]. \quad (\text{A9.5.25})$$

In dieser Form kann die Boltzmann-Gleichung als Ausgangspunkt für die Berechnung der elektrischen und der diffusiven thermischen Leitfähigkeit sowie deren (thermoelektrischer) Kopplung dienen.



A9.6 Freies Elektronengas im Magnetfeld

Wir betrachten ein freies Elektronengas mit einer Dichte von $n = 2.54 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ (Natrium) und einem Volumen von $L_x L_y L_z = 1 \times 1 \times 1 \text{ cm}^3$.

- Berechnen Sie aus der Anzahl N der Elektronen die Anzahl Z_F der im \mathbf{k} -Raum besetzten Zustände, den Radius k_F der Fermi-Kugel und die Anzahl Z_0 der in der Ebene $k_z = 0$ von Elektronen besetzten Zustände.
- Wir legen nun ein Magnetfeld $B = 1 \text{ T}$ in z -Richtung an. Berechnen Sie die Anzahl der Kreise konstanter Energie $\epsilon(n, k_z = 0)$, die sich innerhalb der ursprünglichen Grenzen der Fermi-Kugel befinden. Zeigen Sie, dass der Entartungsgrad p eines solchen Kreises durch

$$p = \frac{L_x L_y e B}{2\pi\hbar}$$

gegeben ist und berechnen Sie den entsprechenden Wert. Welchen Radius besitzen die Extremalbahnen im Ortsraum?

- Bestimmen Sie die Flussdichte B_0 , bei welcher der Landau-Zylinder $n = 1$ die ursprüngliche Fermi-Kugel verlässt. Bis zu welchem Wert $|k_z|$ sind die Zustände des Landau-Zylinders $n = 0$ besetzt? Vergleichen Sie den Wert von B_0 mit technisch realisierbaren Magnetfeldern.
- Wie groß muss die mittlere Stoßzeit der Elektronen mindestens sein, damit de Haas-van Alphen-Oszillationen bei $B = 1 \text{ T}$ gut messbar sind?

Lösung

- (a) Aufgrund der Quantisierung der erlaubten \mathbf{k} -Werte in Einheiten der Größe $\frac{2\pi}{L_x}$, $\frac{2\pi}{L_y}$ und $\frac{2\pi}{L_z}$ entfällt auf jeden Zustand im \mathbf{k} -Raum das Volumen $(2\pi)^3/L_x L_y L_z$. Für die Dichte der Zustände im dreidimensionalen \mathbf{k} -Raum erhalten wir damit

$$Z(\mathbf{k}) = \frac{L_x L_y L_z}{(2\pi)^3} = \frac{V}{(2\pi)^3} . \quad (\text{A9.6.1})$$

Hierbei haben wir die Spin-Entartung außer Acht gelassen. Nach dem Pauli-Prinzip darf aber jeder Zustand mit zwei Elektronen entgegengesetzter Spin-Richtung besetzt werden. Bei einem Volumen von 1 cm^3 und einer Elektronendichte von $n = \frac{N}{V} = 2.54 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ weist damit die Fermi-Kugel insgesamt $Z_F = N/2 = 1.27 \times 10^{22}$ von Elektronen besetzte Zustände auf. Der Radius der Fermi-Kugel ergibt sich mit

$$N = 2 Z(\mathbf{k}) V_{\mathbf{k}} = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{4}{3} \pi k_F^3 \quad (\text{A9.6.2})$$

zu

$$k_F = (3\pi^2 n)^{1/3} . \quad (\text{A9.6.3})$$

Für die angegebene Elektronendichte erhalten wir $k_F = 9.09 \times 10^9 \text{ m}^{-1}$.

Da die Komponente k_z aller erlaubten Zustände im \mathbf{k} -Raum immer ein ganzzahliges Vielfaches von $2\pi/L_z$ sein muss, können wir die Größe $2\pi/L_z$ als Dicke von Schichten mit $k_z = \text{const}$ im \mathbf{k} -Raum ansehen. Die Zahl der in der Schicht mit $k_z = 0$ mit Elektronen besetzten Zustände ergibt sich damit zu

$$Z_0 = Z(\mathbf{k}) \cdot \pi k_F^2 \cdot \frac{2\pi}{L_z} = \frac{L_x L_y}{4\pi} k_F^2 = 6.58 \times 10^{14} . \quad (\text{A9.6.4})$$

- (b) In Anwesenheit eines Magnetfeldes ordnen sich die Zustände im \mathbf{k} -Raum auf konzentrischen Landau-Zylindern an (siehe Abb. 9.1), die wir mit einer Quantenzahl n charakterisieren können. Mit

$$\epsilon_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_c = \hbar^2 k_{\perp}^2(n)/2m \quad \omega_c = eB/m . \quad (\text{A9.6.5})$$

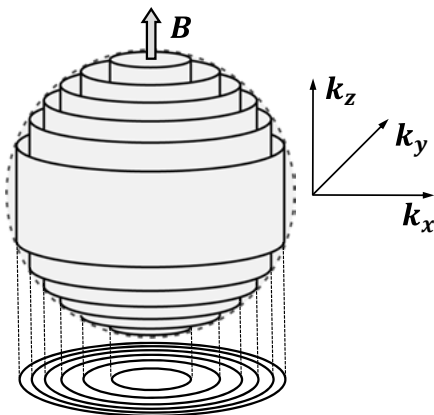


Abb. 9.1: Landau-Zylinder für freie Ladungsträger. Die ohne Magnetfeld im dreidimensionalen \mathbf{k} -Raum gleichmäßig verteilten Zustände innerhalb der Fermi-Kugel werden durch das Magnetfeld auf Zylinder gezwungen. Die Fläche zwischen aufeinander folgenden Zylindern ist $\Delta S = 2\pi eB/\hbar = \text{const}$.

($m_c = m$ für ein freies Elektronengas) erhalten wir den Radius der Landau-Zylinder zu

$$k_{\perp}(n) = \sqrt{\left(n + \frac{1}{2}\right) \frac{2eB}{\hbar}}. \quad (\text{A9.6.6})$$

Mit dem Ansatz $k_{\perp}(n_{\max}) = k_F$ erhalten wir mit $k_F = 9.09 \times 10^9 \text{ m}^{-1}$ aus (A9.6.6)

$$n_{\max} = \frac{\hbar k_F^2}{2eB} - \frac{1}{2}. \quad (\text{A9.6.7})$$

Unter Benutzung von

$$\omega_c = 1.756\,792\,923 \times 10^{11} \text{ Hz} \cdot B [\text{T}] \quad (\text{A9.6.8})$$

ergibt sich für $B = 1 \text{ T}$ der Zahlenwert

$$n_{\max} = 27\,216. \quad (\text{A9.6.9})$$

Unter der Voraussetzung, dass jeder Kreis denselben Entartungsgrad p aufweist, folgt für den Entartungsgrad eines einzelnen Kreises der Wert

$$p = \frac{Z_0}{n_{\max}} = \frac{\frac{L_x L_y}{(2\pi)^2} \frac{\pi k_F^3}{2}}{\frac{\hbar k_F^2}{2eB} - \frac{1}{2}} \simeq \frac{L_x L_y}{(2\pi)^2} \frac{2\pi eB}{\hbar} = \frac{\Phi}{\Phi_0} = 2.42 \times 10^{10}, \quad (\text{A9.6.10})$$

wobei $\Phi = L_x L_y B$ der magnetische Fluss durch die Probe und $\Phi_0 = h/e$ das "normalleitende" magnetische Flussquant ist.²

Für eine alternative Herleitung des analytischen Ausdrucks für p betrachten wir die von einem Landau-Zylinder umschlossene Fläche

$$S_n = \pi k_{\perp}^2(n) = \left(n + \frac{1}{2}\right) \frac{2\pi eB}{\hbar}. \quad (\text{A9.6.11})$$

Die Fläche $\Delta S = S_{n+1} - S_n$ zwischen zwei benachbarten Zylindern ist offenbar eine von der Quantenzahl unabhängige Größe:

$$\Delta S = \frac{2\pi eB}{\hbar}. \quad (\text{A9.6.12})$$

Damit folgt für den Entartungsgrad eines beliebigen, zur $k_x k_y$ -Ebene parallelen Kreises konstanter Energie in einem Landau-Zylinder

$$p = Z(\mathbf{k}) \cdot \Delta S \cdot \frac{2\pi}{L_z} = \frac{L_x L_y L_z}{(2\pi)^3} \cdot \frac{2\pi eB}{\hbar} \cdot \frac{2\pi}{L_z} = \frac{L_x L_y}{(2\pi)^2} \frac{2\pi eB}{\hbar} = \frac{\Phi}{\Phi_0}. \quad (\text{A9.6.13})$$

Der Radius der Extremalbahn im Ortsraum lässt sich aus der Bewegungsgleichung eines Elektrons ($q = -e$) im Magnetfeld

$$\hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} = -e \frac{d\mathbf{r}}{dt} \times \mathbf{B} \quad (\text{A9.6.14})$$

² Die Fluss-Quantisierung wurde zuerst in Supraleitern mit gepaarten Ladungsträgern (Cooper-Paare) entdeckt. Deshalb wurde das Fluss-Quant als $\Phi_0 = h/2e$ definiert.

berechnen. Das Bahnelement Δr bzw. die Fläche im Ortsraum A senkrecht zum Magnetfeld ergibt sich zu

$$\Delta r = \frac{\hbar}{eB} \Delta k \quad (\text{A9.6.15})$$

$$A = \left(\frac{\hbar}{eB} \right)^2 S_n . \quad (\text{A9.6.16})$$

Hieraus lässt sich der Radius r der Extremalbahnen im Ortsraum zu $r = \sqrt{A/\pi}$ berechnen.

- (c) Der Wert für die magnetische Flussdichte B_0 , für die $k_\perp (n=1) = k_F$ wird, erhalten wir mit (A9.6.7) zu

$$B_0 = \frac{\hbar k_F^2}{3e} = 18\,143 \text{ T} . \quad (\text{A9.6.17})$$

Der nun vollständig besetzte Landau-Zylinder mit $n=0$ besitzt nach (A9.6.13) den Entartungsgrad

$$p = \frac{\frac{L_x L_y}{4\pi} k_F^2}{\frac{\hbar k_F^2}{2eB_0} - \frac{1}{2}} = \frac{L_x L_y}{4\pi} k_F^2 = 6.58 \times 10^{14} . \quad (\text{A9.6.18})$$

Da ferner die Gesamtzahl der von Elektronen besetzten Zustände durch

$$Z_F = \frac{N}{2} = \frac{L_x L_y L_z}{(2\pi)^3} \frac{4}{3} \pi k_F^3 \quad (\text{A9.6.19})$$

gegeben ist, enthält der entsprechende Landau-Zylinder insgesamt

$$\alpha = \frac{N}{2p} = \frac{2L_z}{3\pi} k_F = 1.93 \times 10^7 \quad (\text{A9.6.20})$$

von Elektronen besetzte Kreise konstanter Energie. Die Gesamtlänge des von Elektronen besetzten Abschnittes des Landau-Zylinders erhalten wir, indem wir diese Zahl mit der Dicke $2\pi/L_z$ der Schichten mit $k_z = \text{const}$ multiplizieren und erhalten $\alpha \cdot (2\pi/L_z) = \frac{4}{3} k_F$. Dies entspricht besetzten Zuständen im Bereich $-\frac{2}{3} k_F \leq k_z \leq +\frac{2}{3} k_F$.

Die Durchführung eines Experiments, bei dem die Elektronen eines Metalls alle auf den Landau-Zylinder niedrigster Ordnung gezwungen werden, würde Felder in der Größenordnung von einigen 10 000 T erfordern, die technisch nicht realisierbar sind. Mit gepulsten Magnetfeldern können heute nur etwa 100 T erreicht werden. Höhere Felder bis etwa 2500 T können zwar mit Hilfe von Implosionstechniken erzielt werden, bei denen Magnetfelder mit Hilfe von Sprengstoff komprimiert werden, allerdings erlaubt diese Technik dann nur sehr kurze Messzeiten und führt zu einer Zerstörung der untersuchten Probe. Gleichung (A9.6.17) zeigt, dass wir eine Realisierung bei niedrigeren Feldern erreichen können, wenn wir Materialien mit einer kleinen Fermi-Wellenzahl k_F oder äquivalent mit einer kleinen Elektronendichte n verwenden. Heute können mit Halbleiter-Heterostrukturen zweidimensionale Elektronengase mit niedriger Ladungsträgerdichte realisiert werden, bei denen mit Feldern im Bereich von einigen Tesla alle Elektronen auf den Landau-Kreis niedrigster Ordnung gezwungen werden können.

- (d) Damit de Haas-van Alphen-Oszillationen gut beobachtbar sind, muss die Bedingung

$$\omega_c \tau = \frac{eB}{m} \tau \geq 1 \Rightarrow \tau \geq \frac{m}{eB} \quad (\text{A9.6.21})$$

erfüllt sein. Diese Bedingung bedeutet, dass Elektronen zwischen zwei Stößen ein geschlossenes Orbit durchlaufen können. Bei einem Magnetfeld von $B = 1 \text{ T}$ ergibt dies $\tau \geq 5.69 \times 10^{-12} \text{ s}$. Ferner muss

$$\frac{\hbar \omega_c}{k_B T} \geq 1 \Rightarrow \frac{B}{T} \geq \frac{mk_B}{e\hbar} = 0.74 \left[\frac{\text{T}}{\text{K}} \right] \quad (\text{A9.6.22})$$

gelten. Wir müssen also Experimente bei hohen Magnetfeldern und tiefen Temperaturen durchführen.



A9.7 De Haas-van Alphen-Effekt

Die Messung der magnetischen Suszeptibilität $\chi = \mu_0 \partial M / \partial B$ von reinen Metallen zeigt bei tiefen Temperaturen eine oszillierende Abhängigkeit vom angelegten Magnetfeld. Die Oszillationen sind periodisch in $1/B$. Dieser Effekt wird de Haas-van Alphen-Effekt genannt. Mit Hilfe der Beziehung

$$S_{\mathbf{k}} \left(\frac{1}{B_{n+1}} - \frac{1}{B_n} \right) = \frac{2\pi e}{\hbar}$$

erlaubt die Messung des de Haas-van Alphen-Effekts die Bestimmung der Extremalflächen $S_{\mathbf{k}}$ der Fermi-Fläche, welche im \mathbf{k} -Raum von Elektronenbahnen senkrecht zur Richtung des magnetischen Feldes umschlossen werden.

- Betrachten Sie das Elektronengas von Gold als ein System freier Elektronen mit der Dichte $n = 5.9 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ und schätzen Sie ab, welche Größe für die Extremalfläche der Fermi-Kugel zu erwarten ist.
- Im Experiment beobachten wir für ein Feld parallel zur [001]-Richtung eines Gold-Einkristalls Oszillationen mit einer Periode von $\Delta \left(\frac{1}{B} \right) = B_{n+1}^{-1} - B_n^{-1} = 1.95 \times 10^{-5} \text{ T}^{-1}$. Ist das Magnetfeld dagegen parallel zur [111]-Richtung, so werden zwei sich überlagernde Oszillationen mit den Perioden $2.05 \times 10^{-5} \text{ T}^{-1}$ und $6 \times 10^{-4} \text{ T}^{-1}$ beobachtet. Berechnen Sie jeweils die Größe der dazugehörigen Extremalfläche $S_{\mathbf{k}}$ und interpretieren Sie die Ergebnisse anhand der Fermi-Fläche von Gold (siehe Abb. 9.2).
- Berechnen Sie die Periode $\Delta \left(\frac{1}{B} \right)$ für Natrium im Rahmen eines freien Elektronengasmodells. Welchen Radius besitzen die Extremalbahnen im Ortsraum bei $B = 10 \text{ T}$? Natrium besitzt ein bcc-Gitter mit einer Gitterkonstanten von $a = 4.29 \text{ \AA}$.

Lösung

- Für ein freies Elektronengas ist die Fermi-Fläche eine Kugeloberfläche, deren Extremalfläche durch die maximale Querschnittsfläche $S_{\mathbf{k}} = \pi k_F^2$ gegeben ist, die für alle Richtungen gleich ist. Die Fermi-Wellenzahl ist im Modell freier Elektronen durch

$$k_F = (3\pi^2 n)^{1/3} \quad (\text{A9.7.1})$$

gegeben. Setzen wir $n = 5.9 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ ein, so erhalten wir $k_F = 1.2 \times 10^8 \text{ cm}^{-1}$ und damit die Größe der Extremalfläche zu $S_{k_F} = 4.56 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$.

(b) Die Größe einer Extremalfläche lässt sich über die Beziehung (vergleiche Aufgabe A9.6)

$$S_k \left(\frac{1}{B_{n+1}} - \frac{1}{B_n} \right) = \frac{2\pi e}{\hbar} \quad (\text{A9.7.2})$$

aus der gemessenen Magnetfeldperiode $\Delta(1/B) = B_{n+1}^{-1} - B_n^{-1}$ bestimmen. Mit dem Zahlenwert

$$\frac{\hbar}{e} = 6.58 \cdot 10^{-12} \text{ T cm}^2$$

erhalten wir für die [001]-Richtung mit der beobachteten Periode von $1.95 \times 10^{-5} \text{ T}^{-1}$ die Extremalfläche

$$S_k = \frac{2\pi}{6.58 \cdot 10^{-12}} \frac{1}{1.95 \cdot 10^{-5}} \text{ cm}^{-2} = 4.89 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-2}.$$

Diese Fläche stimmt gut mit der im Rahmen der Näherung des freien Elektronengases bestimmten Fläche $S = 4.56 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ überein.

Für die [111]-Richtung erhalten wir für die Periode $2.05 \times 10^{-5} \text{ T}^{-1}$ die Extremalfläche

$$S_k = \frac{2\pi}{6.58 \cdot 10^{-12}} \frac{1}{2.05 \cdot 10^{-5}} \text{ cm}^{-2} = 4.66 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-2},$$

die wiederum der im Rahmen des freien Elektronengases bestimmten Fläche sehr nahe kommt. Die Ursache dafür ist, dass die beiden Extremalflächen den Querschnittsflächen einer nur leicht verformten Fermi-Kugel entsprechen (siehe Abb. 9.2). Die zusätzliche Periode von $6 \times 10^{-4} \text{ T}^{-1}$ entspricht einer wesentliche kleineren Extremalfläche von

$$S_k = \frac{2\pi}{6.58 \cdot 10^{-12}} \frac{1}{6 \cdot 10^{-4}} \text{ cm}^{-2} = 0.16 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-2}.$$

Diese Fläche entspricht den so genannten Halsbahnen, die durch die in [111]-Richtung verlaufenden Ausläufer der Fermi-Fläche entstehen (siehe Abb. 9.2).

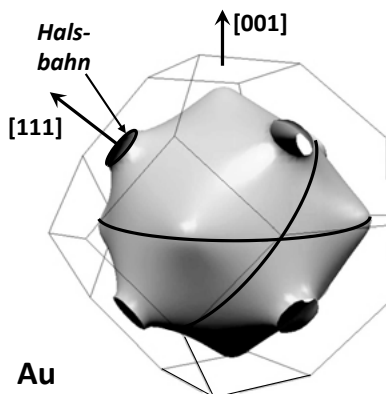


Abb. 9.2: Extremalbahnen für die Fermi-Fläche von Gold für ein in [111]- und [001]-Richtung angelegtes Magnetfeld. Gold besitzt ein kubisch flächenzentriertes (fcc) Raumgitter und damit ein kubisch raumzentriertes (bcc) reziprokes Gitter. Die erste Brillouin-Zone ist ein abgestumpfter Oktaeder mit 8 Sechsecken und 6 Quadraten (Quelle: T.-S. Choy, J. Naset, J. Chen, S. Hershfield, C. Stanton, *A database of Fermi surface in virtual reality modeling language (vrml)*, Bull. Am. Phys. Soc. **45**, L36 42 (2000)).

(c) Bei völlig freien Elektronen würde der Radius der Fermi-Kugel gerade

$$k_F = \left(3\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{1/3} \quad (\text{A9.7.3})$$

beträgen. Da wir bei einer bcc-Struktur in jeder konventionellen Zelle 2 Natriumatome haben, gilt ferner

$$\frac{N}{V} = \frac{2}{a^3}. \quad (\text{A9.7.4})$$

Setzen wir diesen Wert in (A9.7.3) ein, so erhalten wir

$$k_F = \left(\frac{6\pi^2}{a^3} \right)^{1/3} \simeq \frac{3.898}{a} = 0.9085 \text{ \AA}^{-1}. \quad (\text{A9.7.5})$$

Der kürzeste Abstand des Zentrums der 1. Brillouin-Zone zum Zonenrand beträgt für die 1. Brillouin-Zone eines fcc-Gitters (das reziproke Gitter eines bcc-Gitters ist ein fcc-Gitter) gerade $\frac{1}{4} \frac{4\pi}{a} \sqrt{2} \simeq \frac{4.44}{a}$ (siehe Abb. 9.3). Wir sehen, dass dieser Wert größer ist als k_F . Das heißt, die Fermi-Kugel der völlig freien Elektronen berührt den Zonenrand der 1. Brillouin-Zone nicht. Deshalb sollte die Fermi-Fläche der Kristallelektronen von Natrium derjenigen der freien Elektronen sehr ähnlich sein, da ja große Abweichungen nur in der Nähe des Zonenrandes auftreten. Wie Abb. 9.4 zeigt, ist dies für Natrium in der Tat der Fall.

Mit $S_{k_F} = \pi k_F^2 = 2.59 \times 10^{20} \text{ m}^{-2}$ und $S_k \left(\frac{1}{B_{n+1}} - \frac{1}{B_n} \right) = \frac{2\pi e}{h}$ erhalten wir

$$\Delta \left(\frac{1}{B} \right) = \left(\frac{1}{B_{n+1}} - \frac{1}{B_n} \right) = \frac{2\pi e}{h} \frac{1}{S_{k_F}} = 3.68 \times 10^{-5} \text{ T}^{-1}. \quad (\text{A9.7.6})$$

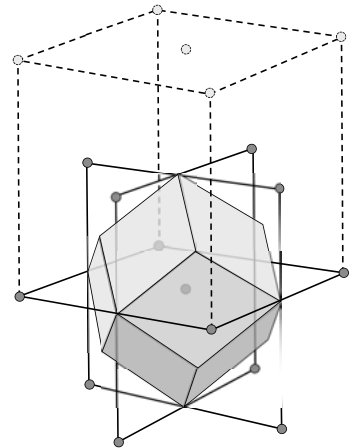


Abb. 9.3: Die 1. Brillouin-Zone eines bcc-Gitters. Sie entspricht der Wigner-Seitz-Zelle eines fcc-Gitters im direkten Raum.

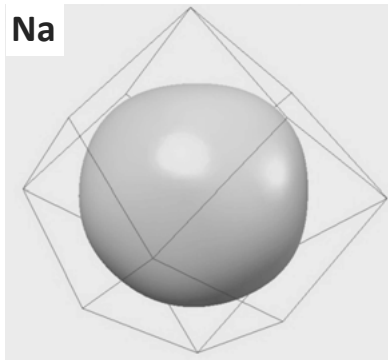


Abb. 9.4: Fermi-Fläche von Natrium. Natrium besitzt ein kubisch raumzentriertes (bcc) Raumgitter und damit ein kubisch flächenzentriertes (fcc) reziprokes Gitter. Die erste Brillouin-Zone ist ein rhombisches Dodekaeder (Quelle: T.-S. Choy, J. Naset, J. Chen, S. Hershfield, C. Stanton, *A database of Fermi surface in virtual reality modeling language (vrml)*, Bull. Am. Phys. Soc. 45, L36 42 (2000)).

Mittels der Bewegungsgleichung eines Elektrons der Ladung $q = -e$ im Magnetfeld

$$\hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} = -e \frac{d\mathbf{r}}{dt} \times \mathbf{B} \quad (\text{A9.7.7})$$

kann das Bahnelement Δr bzw. die Fläche im Ortsraum A senkrecht zum Magnetfeld berechnet werden:

$$\Delta r = \frac{\hbar}{eB} \Delta k \quad (\text{A9.7.8})$$

$$A = \left(\frac{\hbar}{eB} \right)^2 S_k \quad (\text{A9.7.9})$$

Mit dieser Beziehung zwischen der Bahnfläche A im Ortsraum und S im \mathbf{k} -Raum erhalten wir für $B = 10 \text{ T}$ und $S_{k_F} = \pi k_F^2 = 2.59 \times 10^{20} \text{ m}^{-2}$

$$\begin{aligned} A &= \left(\frac{\hbar}{eB} \right)^2 S_{k_F} \\ &= \left(\frac{1.05 \times 10^{-34}}{1.6 \times 10^{-19} \cdot 10} \right)^2 2.59 \times 10^{20} \text{ m}^2 = 1.12 \times 10^{-12} \text{ m}^2 \end{aligned} \quad (\text{A9.7.10})$$

und damit den Radius der Extremalbahn im Ortsraum zu $r = 5.98 \times 10^{-7} \text{ m}$.



A9.8 Extremalbahnen im reziproken Raum

In einem homogenen Magnetfeld B bewegen sich Kristallelektronen im \mathbf{k} -Raum auf Bahnen, die auf Flächen konstanter Energie verlaufen und deren Bahnfläche senkrecht zum angelegten Magnetfeld ist. Für geschlossene Bahnen ist die Umlaufzeit durch

$$T(\epsilon, \mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{eB} \frac{\partial S_\epsilon}{\partial \epsilon}$$

gegeben, wobei S_ϵ die von der Elektronenbahn im \mathbf{k} -Raum umschlossene Fläche senkrecht zu \mathbf{B} ist.

- Begründen Sie qualitativ, warum im Experiment (zum Beispiel beim de Haas-van Alphen-Effekt oder der Zyklotronresonanz) immer nur extreme Bahnen von Elektronen, die sich auf Flächen konstanter Energie bewegen, beobachtet werden.
- Welche Form besitzen die Extremalbahnen im \mathbf{k} -Raum, wenn für die Elektronen eine isotrope $\epsilon(k)$ Beziehung

$$\epsilon(k) = \frac{\hbar^2}{2m^*} \mathbf{k}^2$$

angenommen wird. Berechnen Sie die resultierende Zyklotronfrequenz $\omega_c = eB/m_c$ und zeigen Sie, dass für den angenommenen Spezialfall die Zyklotronmasse m_c mit der effektiven Masse m^* übereinstimmt.

- Betrachten Sie Flächen konstanter Energie, die Rotationsellipsoide

$$\epsilon(k) = \hbar^2 \left(\frac{k_x^2 + k_y^2}{2m_t} + \frac{k_z^2}{2m_l} \right)$$

mit den transversalen und longitudinalen effektiven Massen m_t und m_l darstellen. Berechnen Sie die Zyklotronfrequenz ω_c für $\mathbf{B} \parallel z$ und leiten Sie daraus die Zyklotronmasse m_c ab. Was passiert, wenn wir das Magnetfeld senkrecht zur z -Richtung anlegen?

Lösung

- Um die Frage zu diskutieren, warum sich im Experiment nur Extremalbahnen von Elektronen beobachten lassen, betrachten wir die in Abb. 9.5 gezeigte Fläche konstanter Energie.

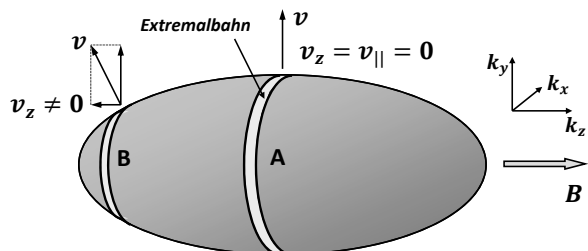


Abb. 9.5: Elliptischer Fermi-Körper zur Veranschaulichung von Extremalbahnen.

Benachbarte Bahnen, die unterschiedliche Wellenzahlkomponenten k_{\parallel} parallel zum anliegenden Magnetfeld haben, besitzen mehr oder weniger stark voneinander abweichende Umlaufzeiten T . Das Besondere der Extremalbahnen ist die Tatsache, dass hier die Änderung der Umlaufzeit infolge einer Änderung von k_{\parallel} verschwindet. Die Beiträge von benachbarten Bahnen in der Umgebung der ExtremalBahn, die phasengleich durchlaufen werden, verstärken sich somit und führen zu einem experimentell beobachtbaren Messsignal. Im Fall der Zyklotronresonanz tragen zum Beispiel die Elektronen im Bereich des mit A gekennzeichneten Bereichs zur Zyklotronresonanz bei. Die Bahnen im mit B gekennzeichneten Bereich besitzen alle stark voneinander abweichende Umlaufzeiten, so dass sich ihre Beiträge gegenseitig kompensieren. Die Elektronen aus diesem Bereich führen also zu keiner Resonanzerscheinung.

(b) Für eine isotrope $\epsilon(\mathbf{k})$ -Beziehung

$$\epsilon(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m^*} \quad (\text{A9.8.1})$$

sind die Flächen konstanter Energie Kugeloberflächen, wobei der Radius der Kugel durch

$$k(\epsilon) = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m^* \epsilon} \quad (\text{A9.8.2})$$

gegeben ist. Das bedeutet, dass die Flächen S_{ϵ} konstanter Energie ϵ Flächen $S_{\mathbf{k}}$ mit einem konstanten Betrag k der Wellenzahl entsprechen. Die einzige Extremalfläche ist die maximale Querschnittsfläche $S_{\mathbf{k}} = \pi k^2(\epsilon) = 2\pi m^* \epsilon / \hbar^2$. Aus der Umlaufzeit

$$T(\epsilon, k) = \frac{\hbar^2}{eB} \frac{\partial S_{\mathbf{k}}}{\partial \epsilon} = 2\pi \frac{m^*}{eB} \quad (\text{A9.8.3})$$

erhalten wir die Zyklotronfrequenz zu

$$\omega_c = \frac{2\pi}{T} = \frac{eB}{m^*}. \quad (\text{A9.8.4})$$

Durch Vergleich dieses Ausdrucks mit der Definition $\omega_c = eB/m_c$ der Zyklotronfrequenz sehen wir sofort, dass in dem betrachteten Spezialfall $m_c = m^*$.

(c) Die Beziehung

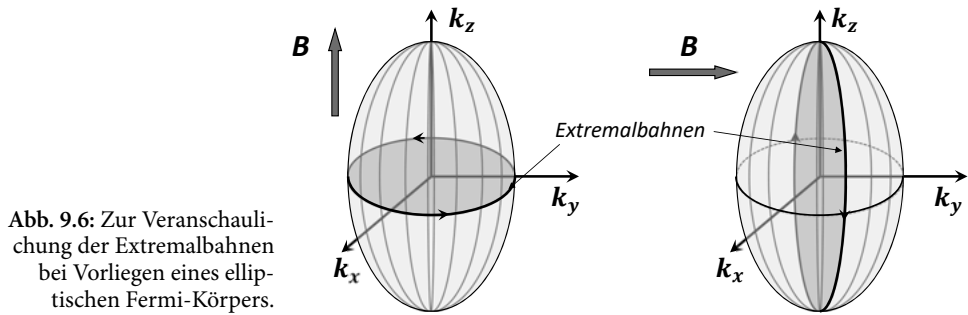
$$\epsilon(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 (k_x^2 + k_y^2)}{2m_t} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_l} \quad (\text{A9.8.5})$$

lässt sich in

$$1 = \frac{k_x^2}{2m_t \epsilon / \hbar^2} + \frac{k_y^2}{2m_t \epsilon / \hbar^2} + \frac{k_z^2}{2m_l \epsilon / \hbar^2} \quad (\text{A9.8.6})$$

umformen. Dies ist die Bestimmungsgleichung eines Ellipsoids mit den Halbachsen

$$a = b = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_t \epsilon} \quad c = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_l \epsilon}. \quad (\text{A9.8.7})$$



Für $\mathbf{B} \parallel \hat{\mathbf{z}}$ umschließen die Extremalbahnen der Ladungsträger eine kreisförmige Fläche der Größe (siehe Abb. 9.6)

$$S_k = \pi a^2 = \frac{2\pi}{\hbar^2} m_t \epsilon. \quad (\text{A9.8.8})$$

Mit (A9.8.3) und (A9.8.4) folgt daraus die Zyklotronfrequenz

$$\omega_c = \frac{eB}{m_t}. \quad (\text{A9.8.9})$$

Wir sehen, dass in diesem Fall die Zyklotronmasse mit der transversalen effektiven Masse m_t übereinstimmt.

Für $\mathbf{B} \perp \hat{\mathbf{z}}$ umschließen die Extremalbahnen der Ladungsträger eine Ellipsenfläche der Größe

$$S_k = \pi a c = \frac{2\pi}{\hbar^2} \sqrt{m_t m_l} \epsilon. \quad (\text{A9.8.10})$$

Die resultierende Zyklotronfrequenz ist

$$\omega_c = \frac{eB}{\sqrt{m_t m_l}}. \quad (\text{A9.8.11})$$

In diesem Fall hat also die Zyklotronmasse den Wert $m_c = \sqrt{m_t m_l}$. Die entsprechenden Extremalbahnen im reziproken Raum sind in Abb. 9.6 dargestellt.