
Kap. 3:

Elektronen in Metallen: Drude-Theorie

3. Drude-Theorie (1)

Metalle: mobile Elektronen = freie Elektronen (?)

Historischer Kontext:

1870 – 1900: Entwicklung der kinetischen Gastheorie (Boltzmann)

1896: Entdeckung des Elektrons (Thomson)

1900: Anwendung der kinetischen Gastheorie auf freie Elektronen in Metallen (Drude)

Grundannahmen der Drude-Theorie:

1. Elektronen unterliegen Streuprozessen. Mittlere Zeit zwischen zwei Streuprozessen ist die Relaxationszeit τ (material- u. temperaturabhängig).
2. Nach einem Streuprozess besitzt ein Elektron einen Impuls von Null.
3. Zwischen Streuprozessen reagieren Elektronen aufgrund ihrer Ladung auf angelegte äußere elektrische und magnetische Felder.

Rechnungen:

- Drude-Bewegungsgleichung
- Ohmsches Gesetz

Konsequenzen:

→ Wahrscheinlichkeit für Streuprozess im Zeitintervall dt : $\frac{dt}{\tau}$

→ Zeitliche Entwicklung des Impulses \vec{p} (Ensemble-Mittelwert):

$$\vec{p}(t+dt) = \vec{0} \cdot \frac{dt}{\tau} + (\vec{p}(t) + \vec{F} dt) \left(1 - \frac{dt}{\tau}\right)$$

↓
Wahrscheinlichkeit
f. Streuung mit
Resultat $\vec{p}=0$

↑
Komplementäre
Wahrscheinlichkeit

$$\cancel{\vec{p}(t)} + \frac{d\vec{p}}{dt} dt = \cancel{\vec{p}(t)} - \cancel{\vec{p}(t)} \frac{dt}{\tau} + \vec{F} dt - \cancel{\vec{F} dt} \frac{dt}{\tau}$$

↑
 $O(dt^2)$, vernachlässigt

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = \vec{F} - \frac{\vec{p}}{\tau}$$

↙
externe Kraft
 $\vec{F} = -e(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B})$

↘
Dissipationsterm
(mikroskop. Analogon zur Reibung)

Ohmsches Gesetz und Leitfähigkeit

Ziel: mikroskop. Verständnis des Ohmschen Gesetzes

Start: $\vec{0} = \frac{d\vec{p}}{dt} = -e\vec{E} - \frac{\vec{p}}{\tau} \Rightarrow \vec{p} = -e\tau\vec{E} = m\vec{v} \Rightarrow \vec{v} = \frac{-e\tau}{m}\vec{E}$

↓
stationäre Verhältnisse

Ohmsches Gesetz: $U = R \cdot I \rightarrow \text{mikroskop.}: \vec{j}(\vec{r}, t) = \sigma \vec{E}(\vec{r}, t)$

Ansatz: $\vec{j} = \rho \vec{v}$ $\rho = -en < 0$ $[n] = 1/m^3$ Anzahldichte

$$= -en\vec{v} = -en \frac{-e\tau\vec{E}}{m} = \frac{e^2 n \tau}{m} \vec{E} \Rightarrow \boxed{\sigma = \frac{e^2 n \tau}{m}}$$

Dissipation: $\vec{v} = \frac{-e\tau}{m}\vec{E} \sim \vec{F}$ gilt nur in dissipativen Systemen

$$\boxed{\vec{v} := \mu \vec{E}}$$

Def. Mobilität μ

3. Hall-Effekt (2)

Experimenteller Befund:

Messung einer Spannung quer zum Stromfluss bei Anlegen eines Magnetfeldes

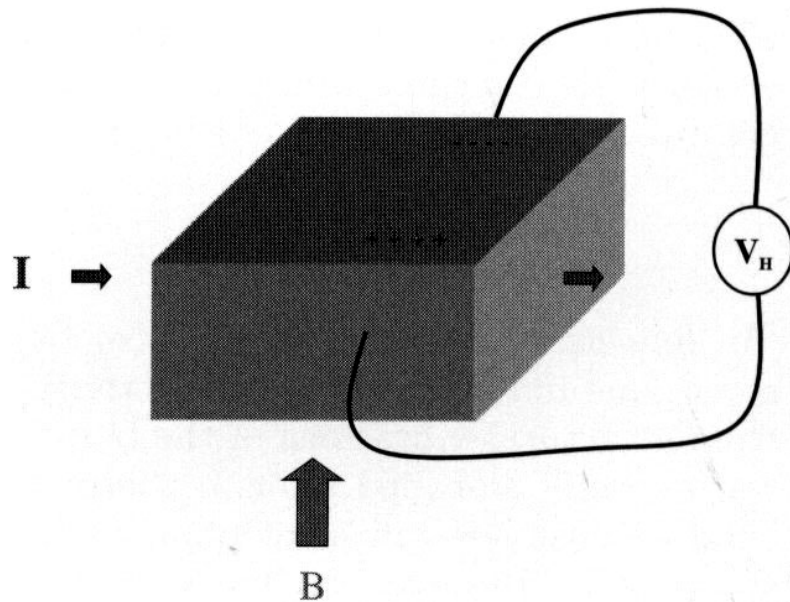


Fig. 3.1 Edwin Hall's 1879 experiment. The voltage measured perpendicular to both the magnetic field and the current is known as the Hall voltage which is proportional to B and inversely proportional to the electron density (at least in Drude theory).

Table 3.1 Comparison of the valence of various atoms to the valence predicted from the measured Hall coefficient.

Material	$\frac{1}{-e R_H n_{atomic}}$	Valence
Li	.8	1
Na	1.2	1
K	1.1	1
Cu	1.5	1
Be	-0.2*	2
Mg	-0.4	2
Ca	1.5	2

Rechnung:
Hall-Effekt

Elektronen in elektrischen und magnetischen Feldern

Ziel: mikroskop. Erklärung des Hall-Effektes

Start:

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = \vec{0} = -e(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}) - \frac{\vec{p}}{\tau}$$

$$\vec{0} = \vec{E} + \vec{v} \times \vec{B} + \frac{\vec{p}}{e\tau}$$

$$\vec{E} = -\vec{v} \times \vec{B} - \frac{\vec{p}}{e\tau}$$

$$\begin{cases} \vec{p} = m\vec{v} \\ \vec{j} = -en\vec{v} \end{cases}$$

$$= \frac{1}{ne} \vec{j} \times \vec{B} - \frac{m\vec{j}}{(e\tau)(-ne)} = \underline{\underline{\rho}} \vec{j}$$

Ohmsches Gesetz: Sonderfall (nur diagonal)

$$\rho_{xx} = \rho_{yy} = \rho_{zz} = \frac{m}{ne^2\tau}$$

Hall-Effekt: Nichtdiagonal-Elemente

↳ ρ_{ee} :

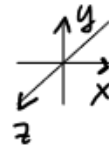
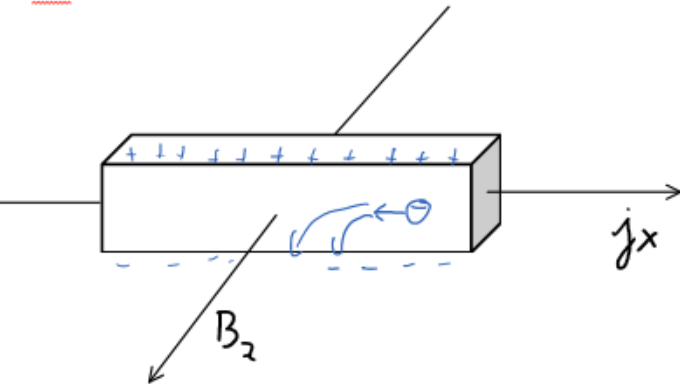
nur E-Feld

$$\vec{E} = \frac{1}{\sigma} \vec{j} = \underline{\underline{\rho}} \vec{j}$$

$$() = (\quad) ()$$

$$= \begin{pmatrix} \rho_{xx} & \rho_{xy} & \rho_{xz} \\ \dots & \rho_{yy} & \rho_{yz} \\ \dots & \dots & \rho_{zz} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_x \\ j_y \\ j_z \end{pmatrix}$$

Def. Hall-Koeffizient



B in z-Richtung

$$\rho_{xy} = \frac{B}{ne} = -\rho_{yx}$$

Lorentz-Kraft $\vec{F} = q \vec{v} \times \vec{B}$

$$F_y = -e v_x B_z < 0$$

Hall-Feld: Coulomb-Kraft $F_c = -e E_H$

$$-e E_H = -e v_x B_z$$

$$j_x = -e n v_x$$

$$E_H = \frac{j_x}{-ne} B_z =: R_H j_x B_z$$

Hall-Koeff. $R_H = \frac{1}{n(-e)}$

Test: 1) Chemie $n = \text{Valenz} \cdot n_{\text{Atom}} = \text{Dichte freier Electr.}$
 einwertige Metalle ✓

2) Streuzeit (= Relaxationszeit τ)
 zweiwertige " ?

$$\sigma = \frac{e^2 n}{m} \tau$$

Al: $\sigma = 3,7 \cdot 10^7 \text{ S/m}$
 $n = 8 \cdot 10^{29} / \text{m}^3$ } $\tau = 1,6 \cdot 10^{-15} \text{ s}$

→ typ. Zeit: fs-Skala

3. Wärmeleitung (3)

Wärmeleitung: Transport thermischer Energie ohne Materietransport

Wärmestrom: $I = \frac{dQ}{dt}$

Einheit: 1 W

Wärmestromdichte: $j_Q = \frac{I}{A}$ Einheit: 1 W / m²

$$\frac{dQ}{dt} = \kappa A \frac{\Delta T}{L}$$

Ursache für Wärmestrom: Temperaturgefälle

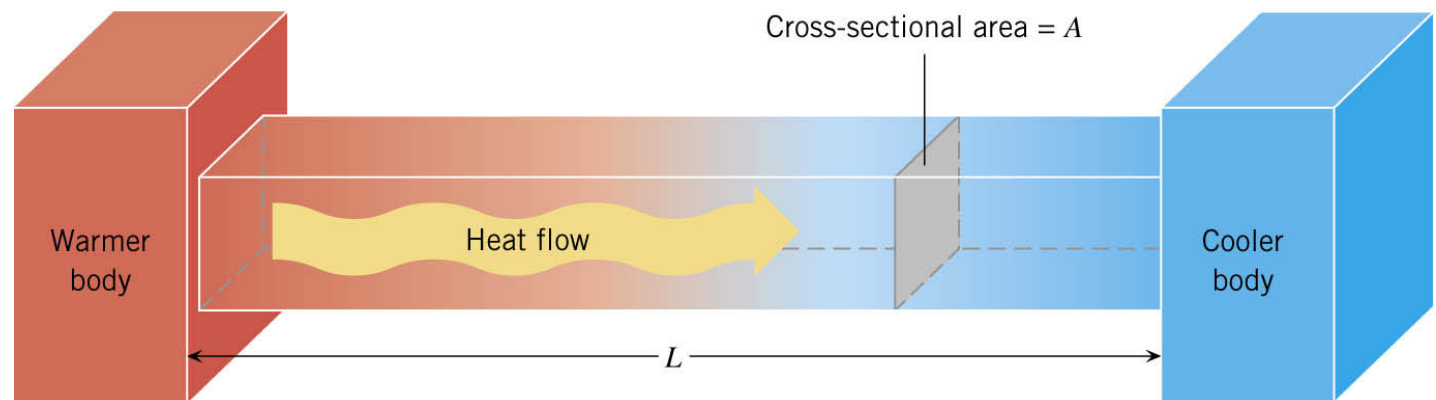
Vektorielles Wärmeleitungsgesetz (Fourier-Gesetz):

$$\vec{j}_Q = -\kappa \nabla T$$

κ : Wärmeleitfähigkeit

Einheit 1 W / K m

Minus: Wärme fließt
von warm nach kalt



3. Wiedemann-Franz-Gesetz (4)

Der größte Erfolg der Drude-Theorie:

- Erklärung des zuvor rein empirischen Wiedemann-Franz-Gesetzes
- Zurückführung auf fundamentale Konstanten k_B und e

Table 3.2 Lorenz numbers $\kappa/(T\sigma)$ for various metals in units of $10^{-8} \text{ WattOhm/K}^2$

Material	L
Lithium (Li)	2.22
Sodium (Na)	2.12
Copper (Cu)	2.20
Iron (Fe)	2.61
Bismuth (Bi)	3.53
Magnesium (Mg)	2.14

Rechnung:
Wiedemann-Franz-Gesetz

Thermische Leitfähigkeit und Wiedemann-Franz-Gesetz

Kinetische Gastheorie:

$$\kappa = \frac{1}{3} n c_v \langle v \rangle \lambda$$

Teilchendichte

spez. Wärme pro Teilchen

$$c_v = \frac{3}{2} k_B$$

mittlere freie Weglänge $\lambda = \langle v \rangle \tau$

$$\langle v \rangle = \sqrt{\frac{8 k_B T}{\pi m}}$$

$$\Rightarrow \kappa = \frac{1}{3} n \frac{3}{2} k_B \frac{8 k_B T}{\pi m} \tau$$

$$= \frac{4 n k_B^2 T}{\pi m} \cdot \tau$$

$$\sigma = \frac{e^2 n}{m} \cdot \tau$$

Therm. Leitf.
Elekt. Leitf.

$$= \frac{\kappa}{\sigma} = \frac{4}{\pi} \left(\frac{k_B}{e} \right)^2 T$$

Lorenz-Zahl

$$L = 0,9 \cdot 10^{-8} \frac{\text{W}\Omega}{\text{K}^2}$$

Fragen: $\tau_{el} \stackrel{?}{=} \tau_{eh}$

$\langle v \rangle$? Alternative $\sqrt{\langle v^2 \rangle}$

Problem mit Wiedemann-Franz-Gesetz

Richtiges Ergebnis wg. Kompensation

Drude: $c_v \cdot \langle v \rangle$

↓

zu groß zu klein!

Beweis:

thermoelekt. Koeff.

2 Größenordnungen falsch

Beweis: $v = \mu E$

$E \approx 1 \text{ V/cm}$

$\mu = \frac{e}{m} \tau \approx 2,9 \cdot 10^{-4} \frac{\text{m}^2}{\text{Vs}} \quad \text{f. Al}$

$\Rightarrow v = 2,9 \cdot 10^{-2} \text{ m/s}$

$\Rightarrow \lambda = v \tau \approx 5 \cdot 10^{-17} \text{ m (Al)}$

viel zu klein!

1% vom Kerndurchmesser!

3. Seebeck-Koeffizient (5)

Seebeck-Effekt: Temperatur-Differenz bewirkt elektrische Potentialdifferenz

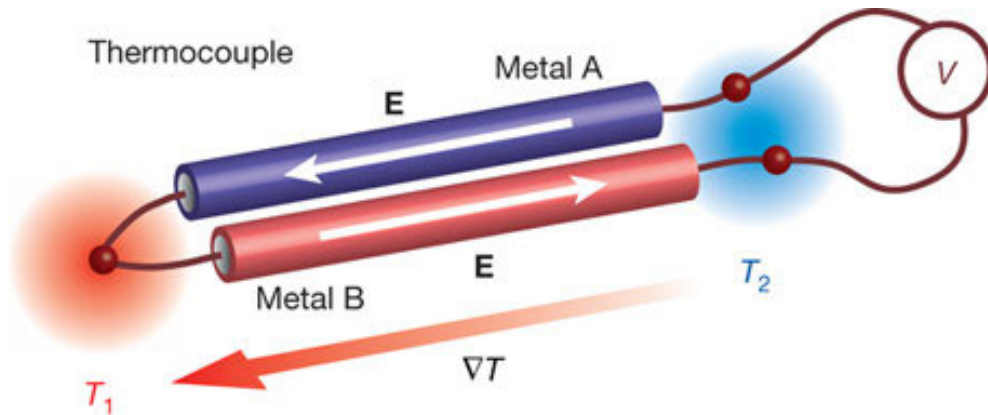


Table 3.3 Seebeck coefficients of various metals at room temperature, in units of 10^{-6} V/K

Material	S
Sodium (Na)	-5
Potassium (K)	-12.5
Copper (Cu)	1.8
Beryllium (Be)	1.5
Aluminum (Al)	-1.8

Vorhersage der Drude-Theorie:

$$S = \frac{-k_B}{2e} = -4,3 \cdot 10^{-4} \text{ V / K}$$

- **2 Größenordnungen zu groß**

Grund: Wärmekapazität des Elektronengases zu groß angesetzt.

**Rechnung:
Transport-Kopplungen**

(4)

Transport als NichtgleichgewichtsphänomenElektrischer Strom \rightarrow Ohmsches Gesetz $\vec{j}_{el} = \sigma \vec{E} = -\sigma \nabla \phi$ Wärmestrom \rightarrow Fouriersches Gesetz $\vec{j}_Q = -\kappa \nabla T$ Teilchenstrom \rightarrow Erstes Ficksches Gesetz $\vec{j}_{Diff} = -D \nabla c$

Ursache	Wirkung:		
	elektrischer Strom	Teilchenstrom	Wärmestrom
$\nabla \phi$	Ohm	(Elektromigration)	Peltier
∇c		Fick	
∇T	Seebeck	(Thermomigration)	Fourier

Nichtdiagonal-Effekt: Kopplung nach Peltier

$$\dot{J}_a = \Pi \dot{J}_e$$

|
Peltier-Koeff.

$\dot{J}_e = -nev$

$$\dot{J}_a = \frac{1}{3} (c_v T) n v$$
$$c_v = \frac{3}{2} k_B$$

$$\Pi = \frac{\dot{J}_a}{\dot{J}_e} = \frac{\frac{1}{3} \frac{3}{2} k_B T n v}{(-e) n v} = - \frac{k_B T}{2e}$$

Seebeck-Koeff: $S = \frac{\Pi}{T} = - \frac{k_B}{2e} = 0(10^{-4} \text{ V/K})$ zu groß!

3. Grenzen der Drude-Theorie (6)

Erfolg und Versagen der Drude-Theorie nebeneinander:

Table 3.2 Lorenz numbers $\kappa/(T\sigma)$ for various metals in units of 10^{-8} WattOhm/K²

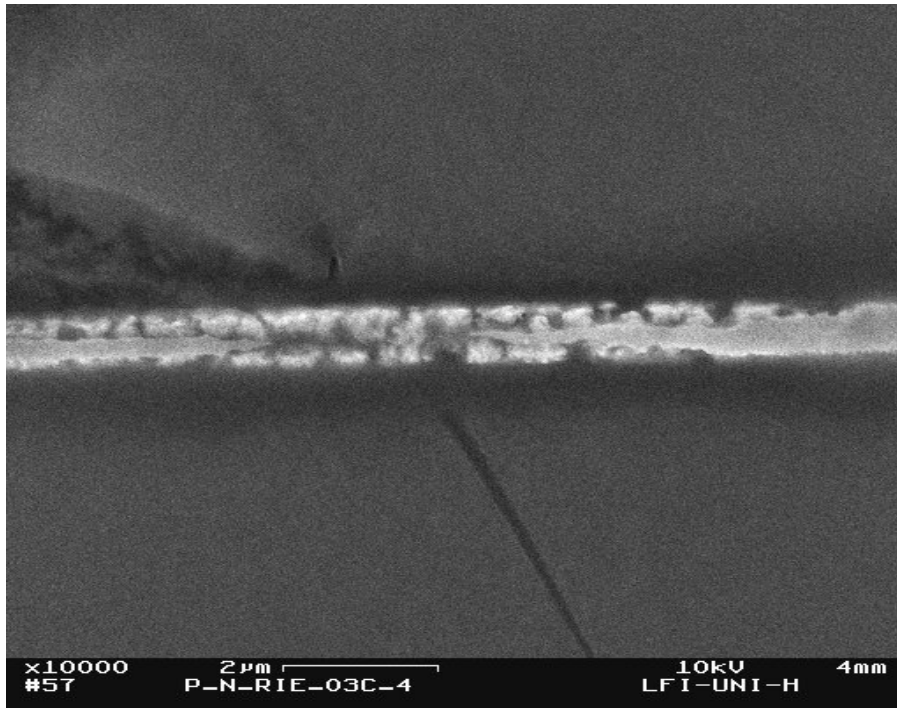
Material	L
Lithium (Li)	2.22
Sodium (Na)	2.12
Copper (Cu)	2.20
Iron (Fe)	2.61
Bismuth (Bi)	3.53
Magnesium (Mg)	2.14

Table 3.3 Seebeck coefficients of various metals at room temperature, in units of 10^{-6} V/K

Material	S
Sodium (Na)	-5
Potassium (K)	-12.5
Copper (Cu)	1.8
Beryllium (Be)	1.5
Aluminum (Al)	-1.8

Exkurs: Elektromigration

- Koppelleffekt: aufgrund eines elektrischen Stroms wird auch Materie transportiert.
- Phänomen seit mehr als 100 Jahren bekannt.
- Ursache: atomare Diffusion bekommt Vorzugsrichtung
(hauptsächlich: Stöße mit Elektronen, Wirkung elektrisches Feld)
- Konsequenzen: u.a. relevanter Ausfallmechanismus für integrierte Schaltkreise



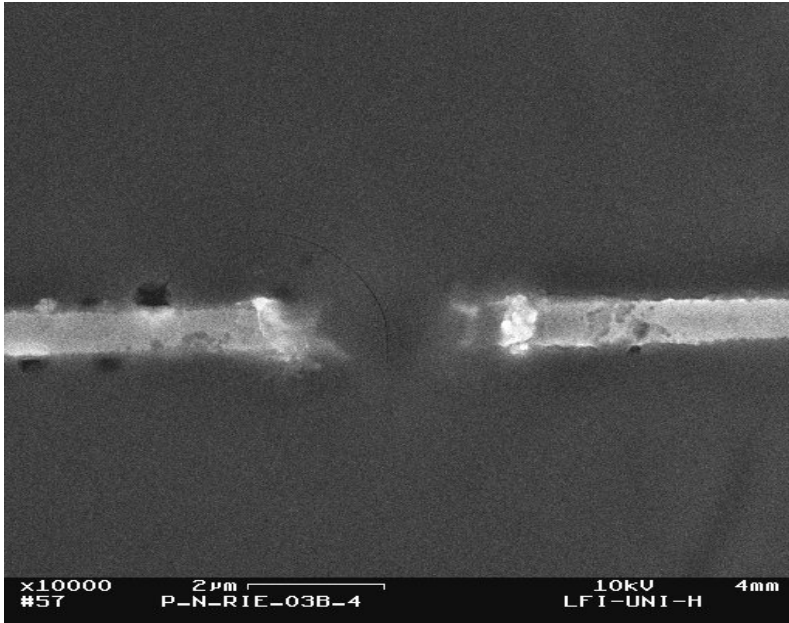
← Leiterbahnausfall durch Unterbrechung
(Breite ca. 800 nm)

Leiterbahn-Material wird
lateral oder in die dritte
Dimension wegtransportiert

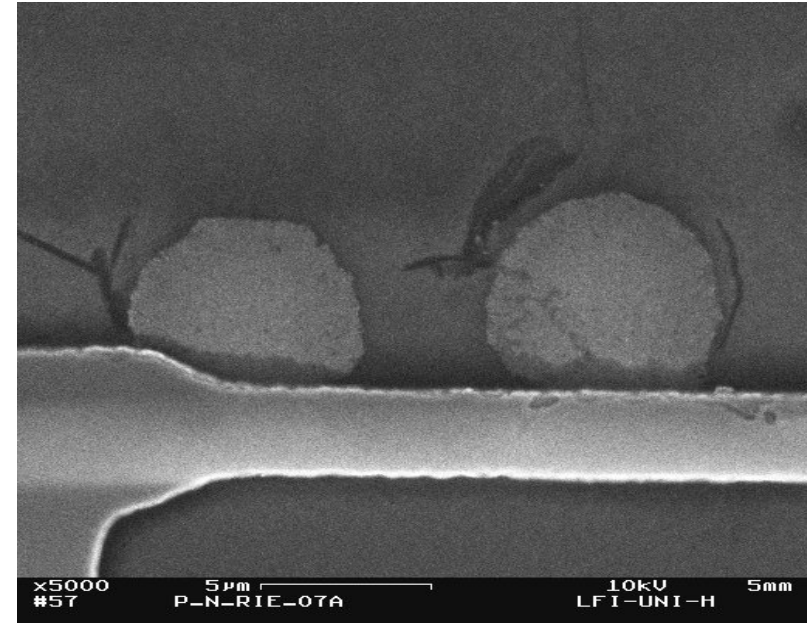
Bildquelle: Wikipedia

Exkurs: Elektromigration

Der Transport kann extreme Formen annehmen:



Weiträumige Unterbrechung

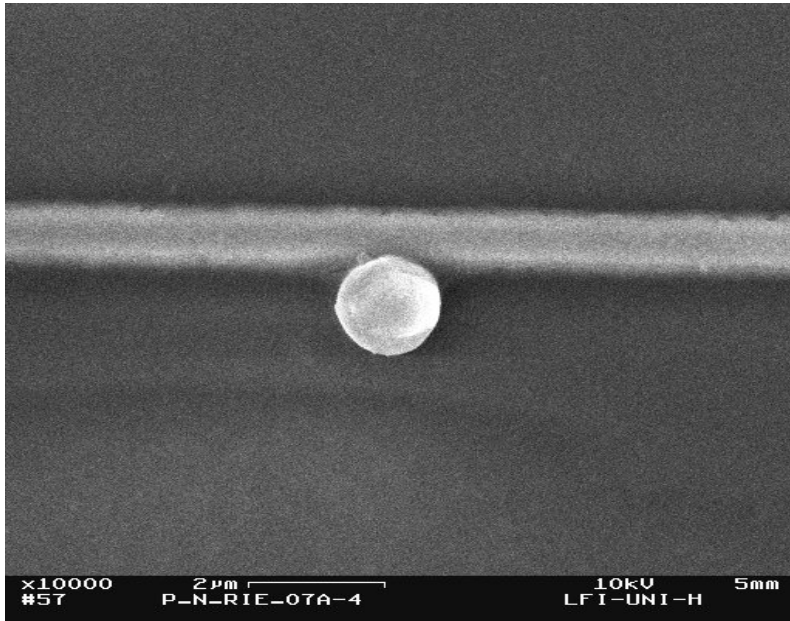


Ausbildung von Hügeln
(„hillocks“)

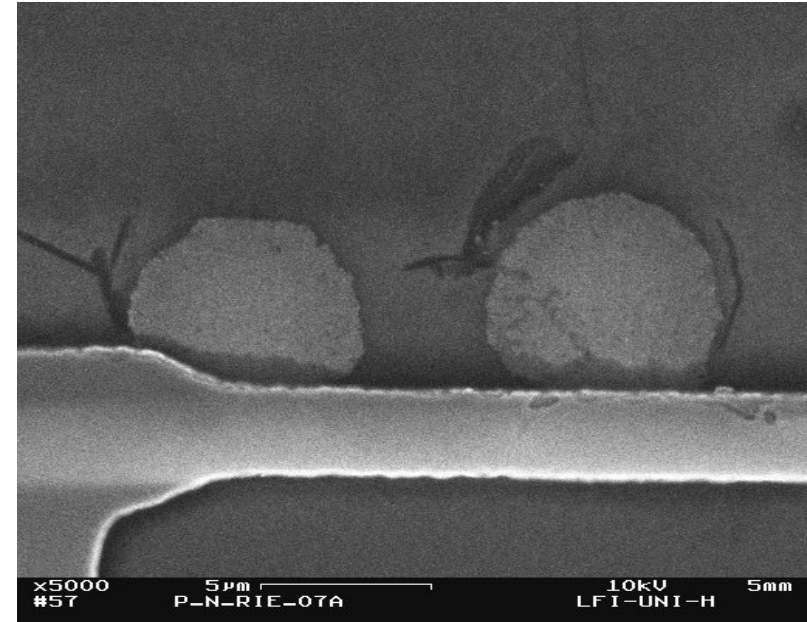
Bildquelle: Wikipedia

Exkurs: Elektromigration

Der Transport kann extreme Formen annehmen:



Extreme Anisotropie:
metallische Fäden („Whisker“)
- Kurzschlussgefahr



Ausbildung von Hügeln
(„hillocks“)

Bildquelle: Wikipedia

