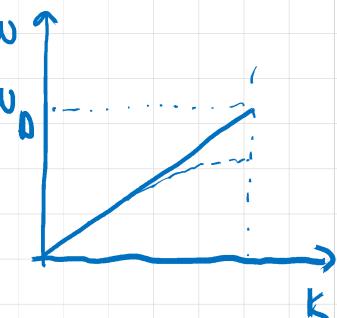
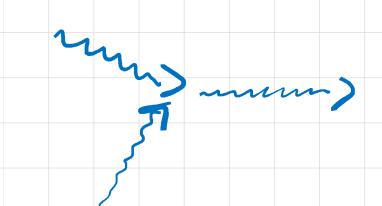


- 
 $D(\omega) \sim \omega^2$ $\xrightarrow{T \ll \Theta_0} C_V = \frac{12}{15} \pi^4 N k_B \left(\frac{T}{\Theta_0}\right)^3$ Delysches T^3 Gesetz
- 
 $D(\omega) \sim S(\omega_E - \omega)$
- Längenausdehnung $\alpha_L = \frac{1}{L} \frac{dL}{dT} = \frac{3b}{4a^2} \frac{k_B}{x_0}$ Einstein Näherung anharmonischer Koeffizient
- 3 Phononprozesse: $h\omega_1 + h\omega_2 = h\omega_3$; $\vec{k}_1 + \vec{k}_2 = \vec{k}_3 + \vec{G}$
- Normalprozesse $\vec{G} = 0$ Umklappprozesse $\vec{G} \neq 0$

- Wärme widerstand durch Umklappprozesse

Wir definieren die Wärmeleitfähigkeit α durch

$$\vec{j}_Q = -\alpha \cdot \nabla T$$

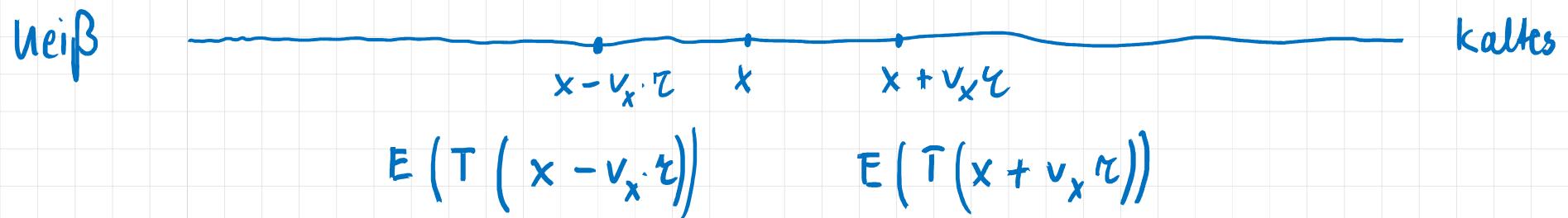


\vec{j}_Q = Wärmestromdichte; $\frac{W}{m^2 s}$

Wir betrachten nun ein vereinfachtes 1D-Modell, in dem Phononen stossende Teilchen (Zeit τ zwischen Stößen) mit mittlerer Geschwindigkeit $|v_x|$ sind, die nach jedem Stoß im Mittel die der lokalen Temperatur T entsprechende Energie E besitzen. Das ist exakt analog dem Wärmetransport in einem Gas.

$$\frac{n}{2} v_x \quad \frac{n}{2} v_x$$

$$n = \frac{N}{V} \stackrel{!}{=} \text{Phonendichte}$$



$$\delta_Q(x) = \frac{1}{2} u v_x \left[E(T(x - v_x \tau)) - E(T(x + v_x \tau)) \right]$$

Entwickeln um x

$$E(T(x - v_x \tau)) = E(T(x)) + \frac{dE}{dT} \frac{dT}{dx}|_x \cdot (-v_x \tau) + \dots$$

$$E(T(x + v_x \tau)) = u \quad " \quad \cdot (v_x \tau) + \dots$$

Ius gesucht

$$\delta_Q = - u v_x^2 \tau \frac{dE}{dT} \cdot \frac{dT}{dx}$$

Mit $u \frac{dE}{dT} = \frac{N}{V} \frac{dE}{dT} = \frac{1}{V} \frac{dU}{dT} = \frac{C_V}{V}$ mit der Verallgemeinierung

auf den 3 Fall und $v_x^2 = v_y^2 = v_z^2 = \frac{1}{3} V^2$

$$\Rightarrow \delta_Q = -\frac{1}{3} V^2 \tau \frac{C_V}{V} \cdot \nabla T$$

$$\Rightarrow \boxed{\delta Q = \frac{1}{3} V^2 \tau \frac{C_V}{V} = \frac{1}{3} V \cdot l \frac{C_V}{V}}$$

$l = V \cdot \tau$

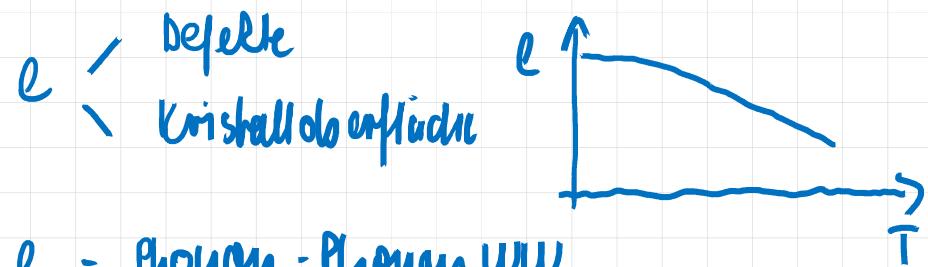
Das Ergebnis hätte man auch direkt aus der kinetischen Gastheorie übernehmen können. Wir werden es in gleicher Weise in der Theorie des freien Elektronengases verwenden.

$$\partial e = \frac{1}{3} v \cdot l \cdot \frac{C_V}{V}$$

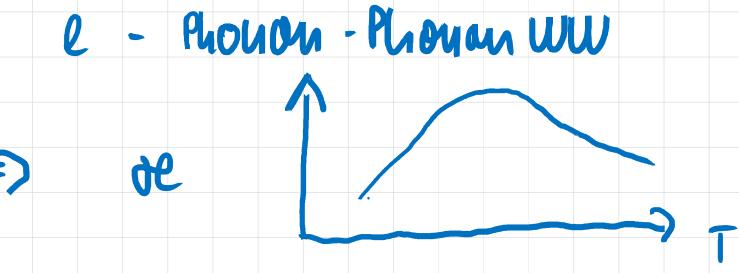
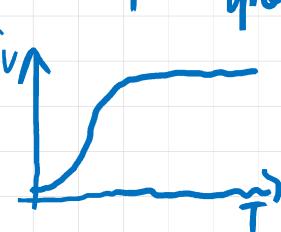
1.) 2.) 3.)

1) $v \hat{=} \frac{d\omega}{dk}$ Gruppengeschwindigkeit der akustischen Phononen

2) $l \hat{=} \begin{cases} \text{mittlere freie Weg-} \\ \text{länge der Phononen} \end{cases} \quad T \text{ klein :}$

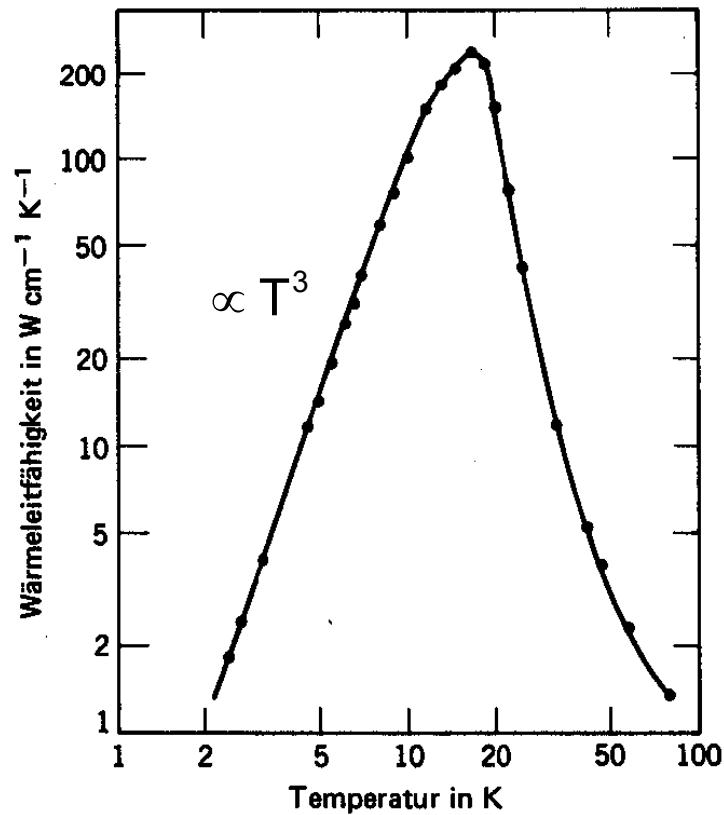


3.) $\frac{C_V}{V} \hat{=} \text{Wärmeleitfähigkeit}$

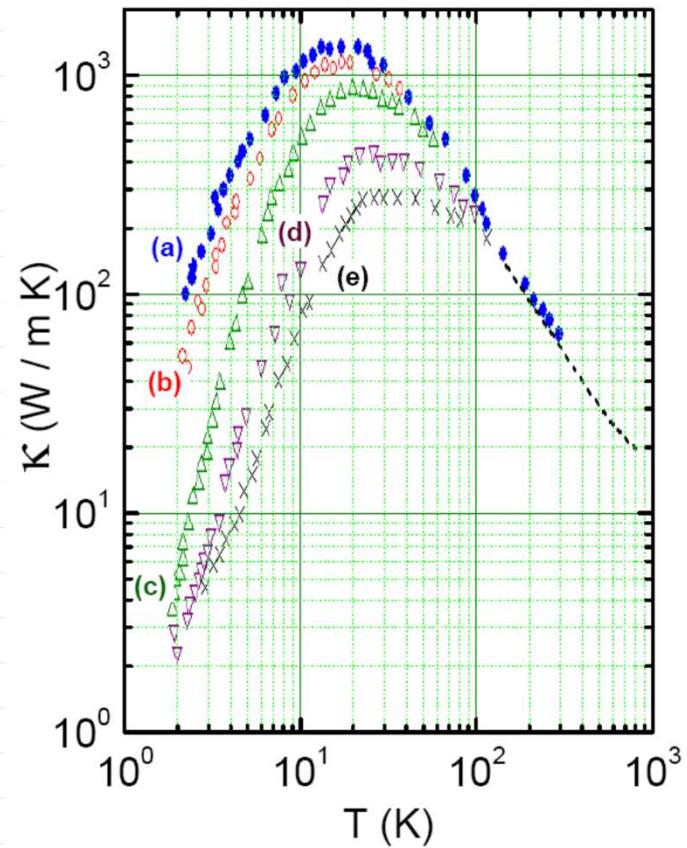


- Beispiele zur Wärmeleitfähigkeit von Materialien

Wärmeleitfähigkeit eines hochreinen NaF-Kristalls

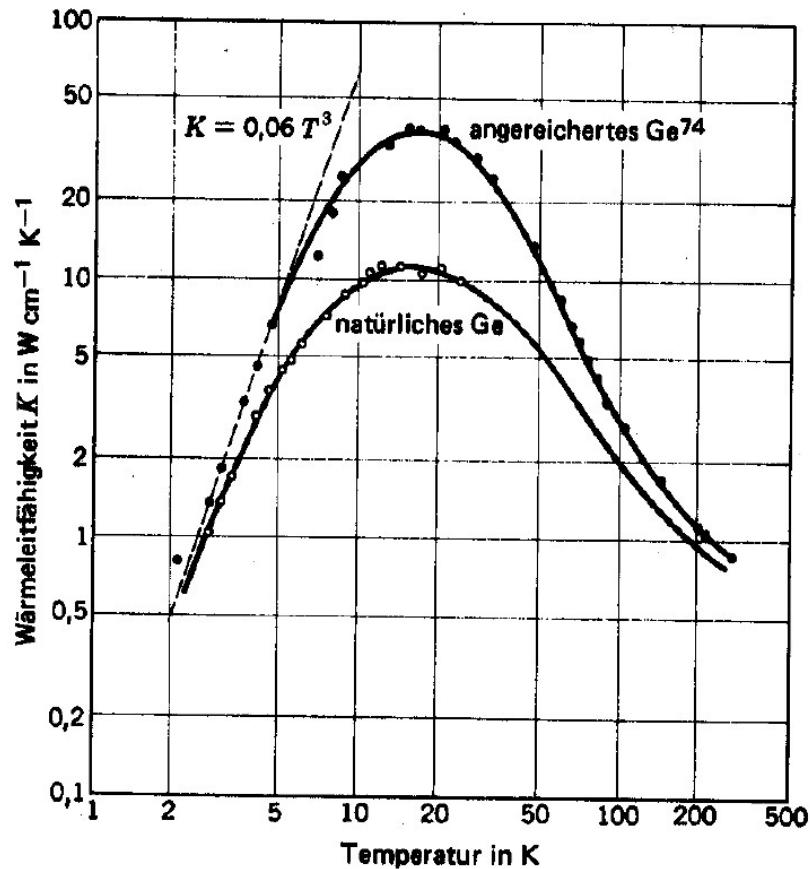


Wärmeleitfähigkeit und Dotierung in Ge

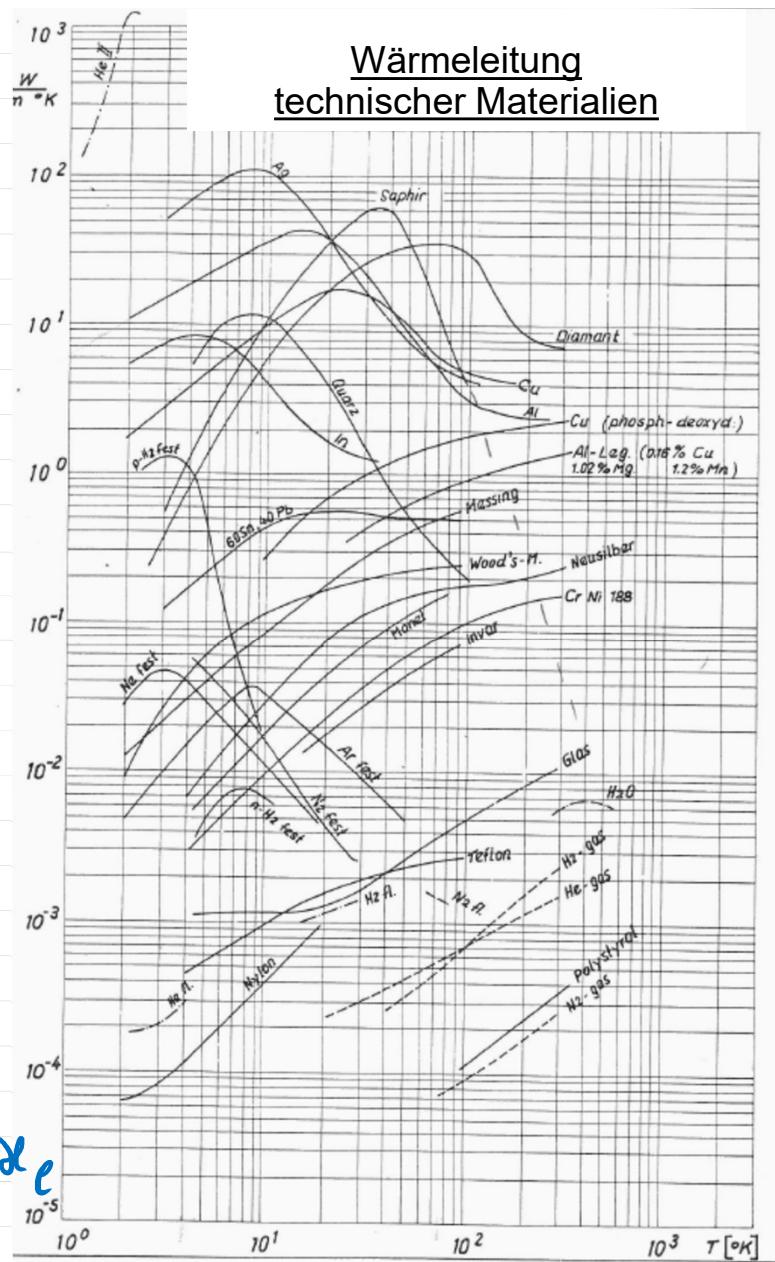


Die Dotierung nimmt von (a) nach (e)
von 10^3 bis $5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ zu.

Wärmeleitung und Isotopeneffekt in Ge



Wärmeleitung technischer Materialien



Bei Metallen kommt nur Wärmeleitung durch Phononen noch der Beitrag der e^- hinzu: $\lambda = \lambda_{ph} + \lambda_e$

7. Das freie Elektronengas

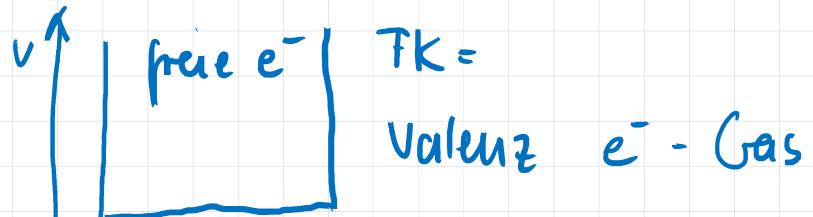
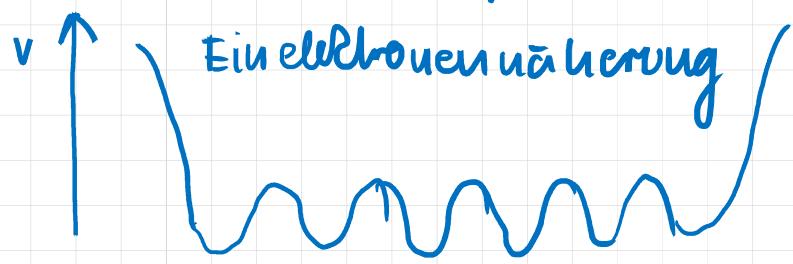
Beschreibung der e^- in FK ist Schlüssel zu

Leitfähigkeit
Supraleitung
Magnetismus
elektronische Bauelemente

Verinfachungen:

- starrer Gitter (keine e^- -Phonon WW)
- Ein elektronenähnlichkeit: e^- in zeitunabhängigem effektiven Potential der Atomrümpe und anderen e^-

freies Gas von e^- {
- unabhängige e^- : keine Berücksichtigung e^-e^- WW
- freie e^- : keine WW e^- -Atomrümpe



freies e^- -Gas

Drude um 1900 - klassisch

hier!

Sommerfeld um 1933 - mit korrekter Quantenstatistik

• e^- im Potentialkasten

$$V(\vec{r}) = 0 \quad 0 \leq x, y, z \leq L$$

$$V(\vec{r}) = \infty : \text{soust}$$



stationäre Schrödingergleichung

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r})$$

im Kasten

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r})$$

Zeitabhängigkeit
als separant

Lösungsansatz

$$\psi(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i \vec{k} \vec{r}}$$

Vorfaktor $\frac{1}{\sqrt{V}}$ aus $\int \Psi^*(\vec{r}) \cdot \Psi(\vec{r}) dV = 1$

Prinzip einsetzen $E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ Dispersionssrelation

Lösungen sind ebene Wellen mit Energie und Impuls exakt definiert, wegen $\Delta p \cdot \Delta r \geq \hbar$ delokalisiert.

- periodische Randbedingungen (wie bei Gitterschwingungen)

$$\Psi(x, y, z) = \Psi(x + L, y, z) \quad \text{analog f\"ur } y, z$$

$$\frac{1}{\sqrt{V}} e^{i(k_x x + k_y y + k_z z)} = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i((k_x(x+L) + k_y y + k_z z))}$$

$$1 = e^{ik_x \cdot L} \Rightarrow k_x \cdot L = n_x 2\pi$$

$$\Rightarrow k_x = \frac{2\pi}{L} \cdot n_x; \quad k_y = \frac{2\pi}{L} \cdot n_y; \quad k_z = \frac{2\pi}{L} \cdot n_z \quad n_i \in \mathbb{Z}$$

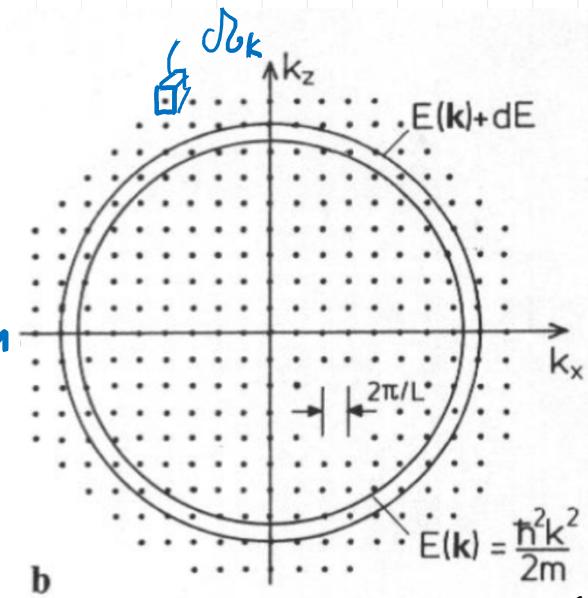
\Rightarrow diskrete Wellenvektoren und diskrete Energien

$$E_n = E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2\pi}{L} \right)^2 \left[n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 \right]$$

Die Zustände im k -Raum sind äquidistant. Zu jedem Tripel n_x, n_y, n_z gibt 2 Zustände mit Spin \uparrow und \downarrow

Pauli-Prinzip verbietet 2 e^- mit allen Quantenzahlen gleich

$$\text{Zustandsvolumen } \Delta k = \frac{2\pi}{L} \cdot \frac{2\pi}{L} \cdot \frac{2\pi}{L} = \frac{(2\pi)^3}{V}$$



$$k\text{-Raum Zustandsdichte} \cdot Z(\vec{k}) = \frac{\# \text{ zuständige}}{k\text{-Raum Vol}} = \frac{2}{\Omega_k} \Rightarrow 2 \cdot \frac{V}{(2\pi)^3}$$

• Wie ist die Zustandsdichte $D(E)$ im Energieraum? wegen Spin!

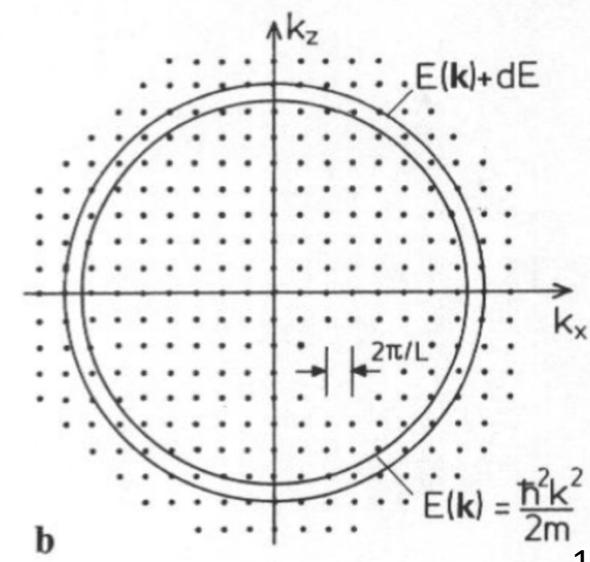
$$D(E) dE = 4\pi k^2 dk \cdot Z(k) = 4\pi k^2 dk \frac{V}{(2\pi)^3} \cdot 2$$

$$\text{da } E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Rightarrow k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \Rightarrow k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \Rightarrow \frac{dk}{dE} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \cdot \sqrt{\frac{1}{E}}$$

$$\Rightarrow D(E) dE = 4\pi \frac{2mE}{\hbar^2} \cdot \frac{1}{2} \left(\frac{2m}{\hbar^2 \cdot E} \right)^{\frac{1}{2}} dE \cdot \frac{V}{(2\pi)^3} \cdot 2$$

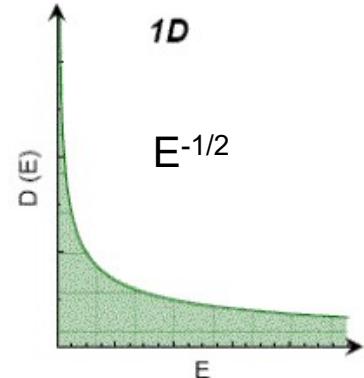
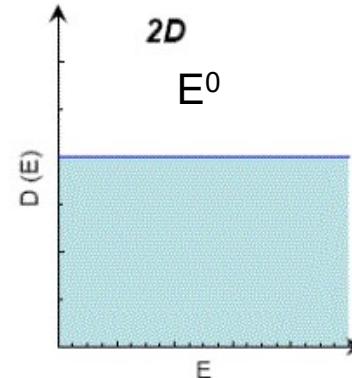
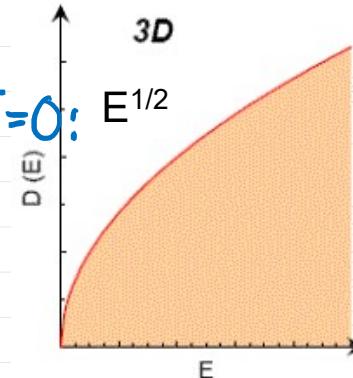
$$\Rightarrow D(E) = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \cdot \sqrt{E}$$

In 2D ist $D(E) = \text{konst}$ und 1D $D(E) \sim \frac{1}{\sqrt{E}}$



• Grundzustand von N e^- ohne WW bei $T=0$:
 e^- sukzessive in Zustände wachsenden E einfüllen, bis bei $E_F = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ alle e^- untergebracht sind

E_F heißt Fermienergie



$E \leq E_F$: besetzt

bei $T=0$ ↘ $E > E_F$: unbesetzt

Fläche $E = \text{konst}$: Kugeloberfläche im k -Raum

Fläche $E = E_F$: Fermifläche, Oberfläche der Fermikugel

$$\text{Aus } N = \int_0^{k_F} z(k) d^3k = \int_0^{k_F} 2 \cdot \left(\frac{V}{(2\pi)^3}\right)^{1/2} 4\pi k^2 dk = \frac{V}{\pi^2} \cdot \frac{1}{3} k_F^3$$

$$k_F = \left(3\pi^2 \frac{N}{V}\right)^{1/3} = (3\pi^2 n_e)^{1/3} \quad \text{Fermiwellenvektor} \quad n_e = \frac{N}{V} \quad \text{Elektronendichte}$$

$$E_F = \frac{e^2 k_F^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(3n^2 n_e \right)^{\frac{1}{3}}$$

Fermi energie

$$k_B \cdot T_F = E_F$$

Fermi temperatur

$$\lambda_F = \frac{2\pi}{k_F}$$

Fermi wellenlänge

$$p_F = m v_F = \hbar k_F$$

Fermi Impuls + - geschw.

$$\text{mit } n_e \approx 5 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3} \Rightarrow$$

$$k_F \approx 10^{10} \text{ m}^{-1}$$

$$\lambda_F \approx 1 \text{ Å}$$

$$v_F \approx 10^6 \text{ m s}^{-1}$$

$$E_F \approx 4 \text{ eV}$$

$$T_F \approx 5 \cdot 10^4 \text{ K} \Rightarrow T \gg T_F \text{ für alle FK}$$

Tabelle 6.1: Berechnete Parameter der Fermi-Flächen für freie Elektronen in Metallen bei Zimmertemperatur.
 (Nur für Na, K, Rb, Cs ist der Wert bei 5 K, und für Li der Wert bei 78 K angegeben.)

Wertigkeit	Metall	Elektronenkonzentration in cm^{-3}	Radius- parameter ^a r_s	Fermi- Wellenvektor in cm^{-1}	Fermi- Geschwindigkeit in cm s^{-1}	Fermi- Energie in eV	Fermi-Temperatur $T_F = \epsilon_F/k_B$ in K
1	Li	$4,70 \times 10^{22}$	3,25	$1,11 \times 10^8$	$1,29 \times 10^8$	4,72	$5,48 \times 10^4$
	Na	2,65	3,93	0,92	1,07	3,23	3,75
	K	1,40	4,86	0,75	0,86	2,12	2,46
	Rb	1,15	5,20	0,70	0,81	1,85	2,15
	Cs	0,91	5,63	0,64	0,75	1,58	1,83
	Cu	8,45	2,67	1,36	1,57	7,00	8,12
	Ag	5,85	3,02	1,20	1,39	5,48	6,36
	Au	5,90	3,01	1,20	1,39	5,51	6,39
2	Be	24,2	1,88	1,93	2,23	14,14	16,41
	Mg	8,60	2,65	1,37	1,58	7,13	8,27
	Ca	4,60	3,27	1,11	1,28	4,68	5,43
	Sr	3,56	3,56	1,02	1,18	3,95	4,58
	Ba	3,20	3,69	0,98	1,13	3,65	4,24
	Zn	13,10	2,31	1,57	1,82	9,39	10,90
	Cd	9,28	2,59	1,40	1,62	7,46	8,66
3	Al	18,06	2,07	1,75	2,02	11,63	13,49
	Ga	15,30	2,19	1,65	1,91	10,35	12,01
	In	11,49	2,41	1,50	1,74	8,60	9,98
4	Pb	13,20	2,30	1,57	1,82	9,37	10,87
	Sn(ω)	14,48	2,23	1,62	1,88	10,03	11,64

^a Der dimensionslose Radiusparameter ist definiert als $r_s = r_0/a_H$; dabei ist a_H der erste Bohrsche Radius und r_0 der Radius einer Kugel, die ein Elektron enthält.

- Einige weitere Fermigas - Relationen

1.) Löse $E_F = \frac{\hbar}{2m} \left(3\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{\frac{2}{3}}$ nach V auf und setze in $D(E)$ ein

$$D(E_F) = \frac{3}{2} \frac{N}{E_F}$$

$$2.) \quad \bar{E} = \frac{1}{N} \int_0^{E_F} D(E) \cdot E \, dE$$

$$= \frac{1}{N} \int_0^{E_F} \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \cdot E^{\frac{3}{2}} \, dE$$

$$= \frac{V}{W} \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{2}{5} E_F^{\frac{5}{2}}$$

$$\text{Da } E_F^{\frac{3}{2}} = \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right)^{\frac{3}{2}} \cdot 3\pi^2 \frac{N}{V} \Rightarrow \bar{E} = \frac{3}{5} E_F = \frac{3}{5} k_B T_F$$

Die mittlere kinetische Energie im Fermigas ist sehr viel größer als in einem klassischen Gas:

$$\text{klassisch } \overline{E} = \underline{\frac{3}{2} k_B T}$$

$$\text{Fermi: } \overline{E} = \underline{\frac{3}{5} k_B T_F} \text{ und } T \ll T_F$$

3.)

$$P = - \left(\frac{\partial E_{\text{gas}}}{\partial V} \right)_{N=\text{const}} = \frac{2}{3} \frac{E_{\text{gas}}}{V}$$

Druck des Fermigases

$$\beta = \frac{1}{\alpha} = -V \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_{T=\text{const}} = \frac{2}{3} \alpha E_F \quad \text{Kompressionsmodul des F.-gas}$$

(ohne Beweis)