

Kapitel 7

Das freie Elektronengas

In den vorangegangenen Kapiteln haben wir die Eigenschaften von Isolatoren behandelt. Bei diesen Materialien sind die Elektronen fest an die Gitteratome gebunden, wir sprechen von *lokalisierten Elektronen*. Wir wollen uns nun den Eigenschaften von Materialien zuwenden, bei denen *delokalisierte Elektronen* vorliegen. Um zunächst ein handhabbares Modell für solche Systeme zu entwickeln, werden wir zwei grundlegende Annahmen machen:

1. die Elektronen wechselwirken nicht mit den Atomrümpfen
2. die Elektronen wechselwirken nicht miteinander

Das heißt, wir gehen von völlig freien Elektronen aus, die ein Gas von nicht-wechselwirkenden Teilchen bilden. Wir sprechen deshalb von einem *freien Elektronengas*. Obwohl die obigen Annahmen eine starke Vereinfachung darstellen, werden wir viele Eigenschaften von Metallen mit dem System freier Elektronen beschreiben können. Bei der Diskussion des freien Elektronengases wird allerdings, genauso wie bei dem Phononengas in Kapitel 6, eine rein klassische Beschreibung nicht ausreichen. Wir müssen vielmehr eine quantenmechanische Beschreibung vornehmen. Eine wichtige Rolle wird dabei spielen, dass Elektronen Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen sind, die im Gegensatz zu den Phononen der Fermi-Dirac-Statistik folgen. Das heißt, wir müssen für sie das Pauli-Prinzip beachten.

Selbst in einfachen Metallen wie z.B. Li, Na oder K, für die das Modell des freien Elektronengases am besten funktioniert, liegt ein periodisches Potenzial der positiven Ionenrümpfe vor, das die Ladungsverteilung der Elektronen beeinflusst. Wir werden deshalb später das Modell des freien Elektronengases in Kapitel 8 erweitern, um die Wechselwirkung der Elektronen mit den Ionen des Gitters zu berücksichtigen. Generell kann man sagen, dass das Modell der völlig freien Elektronen immer dann gut zur Beschreibung von Festkörpern funktioniert, wenn die diskutierten Eigenschaften im Wesentlichen durch die kinetische Energie bestimmt werden.

Historisch betrachtet wurde die Beschreibung von Metallen im Rahmen der Bewegung von völlig freien Elektronen lange vor der Entwicklung der Quantenmechanik vorgenommen. Bereits um 1900, kurz nach der Entdeckung des Elektrons durch **J.J. Thomson** im Jahr 1897, wurde von **Paul Drude**¹ eine klassische Modellvorstellung für ein Gas freier Elektronen entwickelt.² Diese klassische Theorie basierte zwar auf der falschen Annahme, dass die Geschwindigkeitsverteilung der Elektronen im freien Elektronengas durch die klassische Maxwell-Boltzmann-Verteilung beschrieben werden kann, hatte aber trotzdem einige eher zufällige Erfolge wie die

¹Paul Drude, geboren am 12. 07. 1863 in Braunschweig, gestorben am 05. 07. 1906 in Berlin.

²Paul Drude, Annalen der Physik **1**, 556 (1900) und **3**, 369 (1900).

Arnold Sommerfeld (1868 – 1951):

Arnold Sommerfeld wurde am 5. Dezember 1868 in Königsberg geboren.

Er begann 1886 ein Studium der Mathematik und Physik an der Universität Königsberg. Bereits im Jahr 1891 promovierte er an der Universität Königsberg über *Die willkürlichen Functionen in der mathematischen Physik*. Er legte dann 1892 die staatliche Prüfung für das Lehramt ab und musste anschließend seinen Militärdienst ableisten

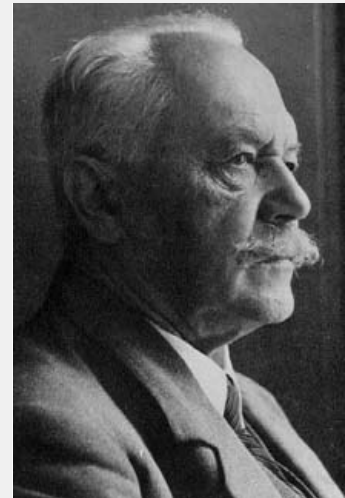
Im Jahr 1893 wurde er Assistent bei dem Mineralogen Theodor Liebig an der Universität Göttingen und später (1894-1896) Assistent bei dem Mathematiker Felix Klein ebenfalls an der Universität Göttingen. Im Jahr 1895 habilitierte er sich in Göttingen mit einer Arbeit zur "Mathematischen Theorie der Beugung". Er wurde wenig später (1897) Professor für Mathematik an der Bergakademie Clausthal, wo er bis 1890 blieb. Anschließend wurde er Professor für Mechanik an der TH Aachen (1900-1906) und schließlich im Jahr 1906 ordentlicher Professor für theoretische Physik an der Universität München.

In der Zeit zwischen 1897-1910 beschäftigte sich Sommerfeld u.a. mit der Theorie des Kreisels (vier Bände mit Felix Klein). Er war ferner zwischen 1898 und 1926 Redakteur der Physikbände der Enzyklopädie der Mathematischen Wissenschaften. In die Jahre 1904/05 fallen seine Untersuchungen zur Schmiermittelreibung und Elektronentheorie. Besonders bedeutend sind seine Arbeiten zur Atomtheorie (Bohr-Sommerfeldsches Atommodell, Feinstrukturkonstante, 1915/16) und zur Elektronentheorie der Metalle (1927). Bereits in das Jahr 1919 fällt die erste Auflage des Buch "Atombau und Spektrallinien". Im Jahr 1942 erschien sein Lehrbuch "Die Mechanik" als erster Band seiner sechsbändigen Lehrbuchreihe "Vorlesungen über theoretische Physik", die erst posthum abgeschlossen wurde.

Arnold Sommerfeld war Vorsitzender der Deutschen Physikalischen Gesellschaft (1918). Er erhielt im Jahr 1922/23 die Carl-Schurz-Gedächtnisprofessur in Madison, Wisconsin. In den Jahren 1928/29 führte er eine Weltreise durch, während der er Indien, China, Japan und die USA besuchte. In den Jahren 1935-1940 führte Sommerfeld eine heftige Auseinandersetzung um seinen Nachfolger. Er konnte allerdings nicht verhindern, dass sich die so genannte "Deutsche Physik" mit ihrem Vertreter W. Müller durchsetzte.

Arnold Sommerfeld war Vorsitzender der Deutschen Physikalischen Gesellschaft (1918). Er erhielt im Jahr 1922/23 die Carl-Schurz-Gedächtnisprofessur in Madison, Wisconsin. In den Jahren 1928/29 führte er eine Weltreise durch, während der er Indien, China, Japan und die USA besuchte. In den Jahren 1935-1940 führte Sommerfeld eine heftige Auseinandersetzung um seinen Nachfolger. Er konnte allerdings nicht verhindern, dass sich die so genannte "Deutsche Physik" mit ihrem Vertreter W. Müller durchsetzte.

Arnold Sommerfeld starb am 26. April 1951 an den Folgen eines Unfalls.



Ableitung des Ohmschen Gesetzes oder des Verhältnisses zwischen elektrischer und thermischer Leitfähigkeit. Diese klassische Theorie konnte aber nicht die spezifische Wärme, die Thermokraft oder die magnetische Suszeptibilität von Metallen erklären. Nach der Entwicklung der Quantenmechanik hat dann **Arnold Sommerfeld**³ die Drudesche Theorie auf eine quantenmechanische Basis gestellt. Wir sprechen deshalb heute oft vom *Drude-Sommerfeld-Modell* des freien Elektronengases. Sommerfeld hat das Paulische Ausschließungsprinzip auf die freien Elektronen angewendet und ihre Geschwindigkeitsverteilung mit der richtigen Quantenstatistik, nämlich der Fermi-Dirac-Statistik beschrieben (Übergang vom klassischen zum Quantengas).

³Arnold Sommerfeld, geboren am 5. Dezember 1868 Königsberg, gestorben am 26. April 1951 in München.

7.1 Modell des freien Elektronengases

7.1.1 Grundzustand

Wir betrachten N freie, nicht-wechselwirkende Elektronen, die in einem Volumen $V = L^3$ durch unendlich hohe Potenzialwände eingeschlossen sind. Wir betrachten zunächst den Grundzustand dieses Systems bei $T = 0$. Da die Elektronen nicht wechselwirken, genügt es, das quantenmechanische Problem für ein Elektron zu lösen. Das Elektron im Potenzialkasten beschreiben wir durch eine Wellenfunktion $\Psi(\mathbf{r}, \sigma)$, wobei σ den Spin des Elektrons bezeichnet. Die Energieeigenzustände für dieses freie Elektron ($V = 0$) erhalten wir durch Lösen der Schrödinger-Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}, \sigma) = E \Psi(\mathbf{r}, \sigma) . \quad (7.1.1)$$

Lösungen sind ebene Elektronenwellen

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \quad (7.1.2)$$

mit Wellenvektor \mathbf{k} und de Broglie Wellenlänge $\lambda = 2\pi/|\mathbf{k}|$ sowie der Normierung

$$\int_V d^3r |\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})|^2 = 1 . \quad (7.1.3)$$

Das heißt, die Wahrscheinlichkeit, das Elektron irgendwo innerhalb des Potenzialkastens mit Volumen V zu finden ist Eins. Einsetzen in die Schrödinger-Gleichung ergibt die Dispersionsrelation für die freien Elektronen zu

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} . \quad (7.1.4)$$

Die ebenen Wellen $\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ sind Eigenfunktionen des Impulsoperators $\frac{\hbar}{i} \nabla$. Es gilt nämlich

$$\frac{\hbar}{i} \nabla \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \hbar \mathbf{k} \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) . \quad (7.1.5)$$

Wir sehen, dass die Zustände $\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ einen wohldefinierten Impuls

$$\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k} \quad (7.1.6)$$

haben. Mit der Impuls-Orts-Unschärferelation bedeutet dies, dass die Ortsunschärfe beliebig groß ist, wir haben es mit vollkommen delokalisierten Elektronen zu tun.

Randbedingungen

Als Randbedingung haben wir vorgegeben, dass die Elektronen durch unendlich hohe Potenzialwalle in das Volumen $V = L_x \cdot L_y \cdot L_z$ eingesperrt sind. Daraus ergeben sich die Randbedingungen

$$\Psi_{\mathbf{k}}(x, y, z) = \Psi_{\mathbf{k}}(x + L_x, y, z) \quad (7.1.7)$$

$$\Psi_{\mathbf{k}}(x, y, z) = \Psi_{\mathbf{k}}(x, y + L_y, z) \quad (7.1.8)$$

$$\Psi_{\mathbf{k}}(x, y, z) = \Psi_{\mathbf{k}}(x, y, z + L_z) \quad (7.1.9)$$

Wir sehen sofort (vergleiche hierzu Abschnitt 5.3), dass aufgrund dieser Randbedingungen nur bestimmte Wellenvektoren zulassig sind:

$$k_x = \frac{2\pi}{L_x} n_x \quad k_y = \frac{2\pi}{L_y} n_y \quad k_z = \frac{2\pi}{L_z} n_z \quad (7.1.10)$$

mit $n_{x,y,z} = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$

Im Gegensatz zu den Gitterschwingungen, die wir in Abschnitt 5.3 behandelt haben, gibt es hier keinen maximalen Wellenvektor bzw. minimale Wellenlange. Bei den Gitterschwingungen wurde der maximale Wellenvektor π/a durch den Rand der 1. Brillouin-Zone gegeben und resultierte aus der periodischen Anordnung der Gitteratome mit Abstand a . Hier betrachten wir ein in ein Volumen eingesperrtes Teilchengas ohne jegliche periodische Struktur. Es existiert deshalb hier kein maximaler Wellenvektor.

Einen bestimmten Elektronenzustand konnen wir durch die Angabe der drei Zahlen n_x, n_y und n_z sowie durch Angabe des Spinindex $\sigma = \pm \frac{1}{2}$ spezifizieren. Aufgrund der zwei moglichen Spinstellungen gibt es also zu jedem Wellenvektor \mathbf{k} genau zwei Elektronenzustande mit unterschiedlicher Spinrichtung. Die Energieeigenwerte dieser Zustande lauten

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{(2\pi)^2}{L_x^2} n_x^2 + \frac{(2\pi)^2}{L_y^2} n_y^2 + \frac{(2\pi)^2}{L_z^2} n_z^2 \right] \quad (7.1.11)$$

Zustandsdichte im \mathbf{k} -Raum

Wie Abb. 7.1 zeigt, liegen die erlaubten Zustande im \mathbf{k} -Raum in jede Richtung aquidistant. Teilen wir den \mathbf{k} -Raum in gleiche Teile auf, die alle jeweils nur einen Zustand enthalten, so erhalten wir fur die Strecke, Flache bzw. Volumen pro Zustand im 1D-, 2D- bzw 3D-Impulsraum

$$1\text{D:} \quad \frac{2\pi}{L_x} \quad (7.1.12)$$

$$2\text{D:} \quad \frac{(2\pi)^2}{L_x L_y} = \frac{(2\pi)^2}{A} \quad (7.1.13)$$

$$3\text{D:} \quad \frac{(2\pi)^3}{L_x L_y L_z} = \frac{(2\pi)^3}{V} \quad (7.1.14)$$

Fur die dreidimensionale Zustandsdichte $Z(\mathbf{k})$ fur beide Spinrichtungen erhalten wir in Analogie zu (5.3.23)

$$Z(\mathbf{k}) = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \cdot \quad (7.1.15)$$

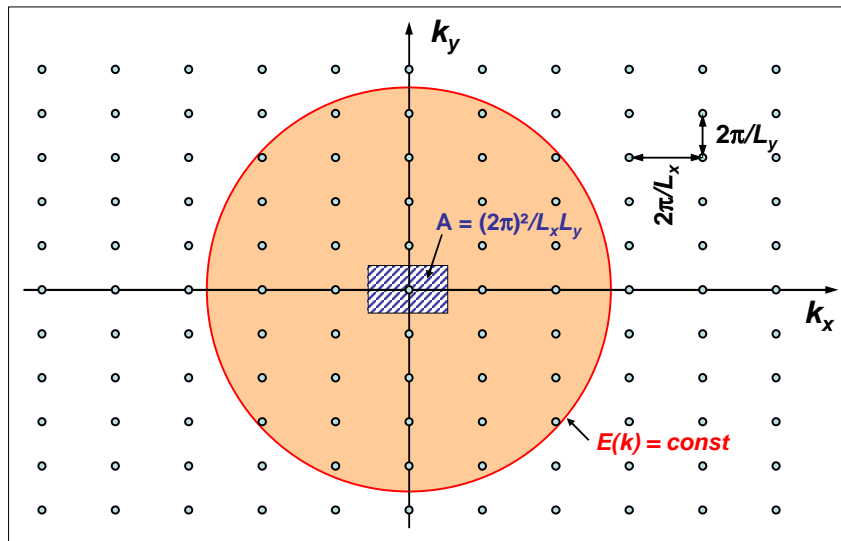


Abbildung 7.1: Erlaubte Zustände im zweidimensionalen \mathbf{k} -Raum und \mathbf{k} -Raumfläche pro Zustand (schraffiert). Die Fläche konstanter Energie ist ein Kreis mit Radius $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$.

Entsprechende Ausdrücke ergeben sich für den 1D- oder 2D-Fall. Wir erhalten bis auf den Faktor 2 durch die beiden möglichen Spinrichtungen das gleiche Ergebnis wie für die Phononen. Wird V groß, so liegen die Zustände im \mathbf{k} -Raum sehr dicht und wir können $\sum_{\mathbf{k}}$ durch $\int d^3k Z(\mathbf{k})$ ersetzen.

Zustandsdichte im Energieraum

Die Zustandsdichte $D(E)$ im Energieraum erhalten wir mit Hilfe der Dispersionsrelation (7.1.4). Mit (vergleiche (5.3.27))

$$Z(\mathbf{k})d^3k = D(E)dE \quad (7.1.16)$$

und der Tatsache, dass die Flächen konstanter Energie Kugeloberflächen sind, erhalten wir für einen dreidimensionalen Festkörper

$$Z(\mathbf{k})d^3k = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi k^2 dk = D(E)dE \quad (7.1.17)$$

Mit $dE = \frac{\hbar^2 k}{m} dk$ erhalten wir dann die Zustandsdichte für beide Spinrichtungen

$$D(E) = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} E^{1/2} \quad (3\text{D-Elektronengas}) \quad (7.1.18)$$

Entsprechende Beziehungen können wir für ein- und zweidimensionale Elektronengassysteme ableiten, wie sie heute häufig in Halbleiterheterostrukturen realisiert werden. Für ein zweidimensionales Elektronengas gilt

$$Z(\mathbf{k})d^2k = 2 \frac{A}{(2\pi)^2} 2\pi k dk = D(E)dE \quad (7.1.19)$$

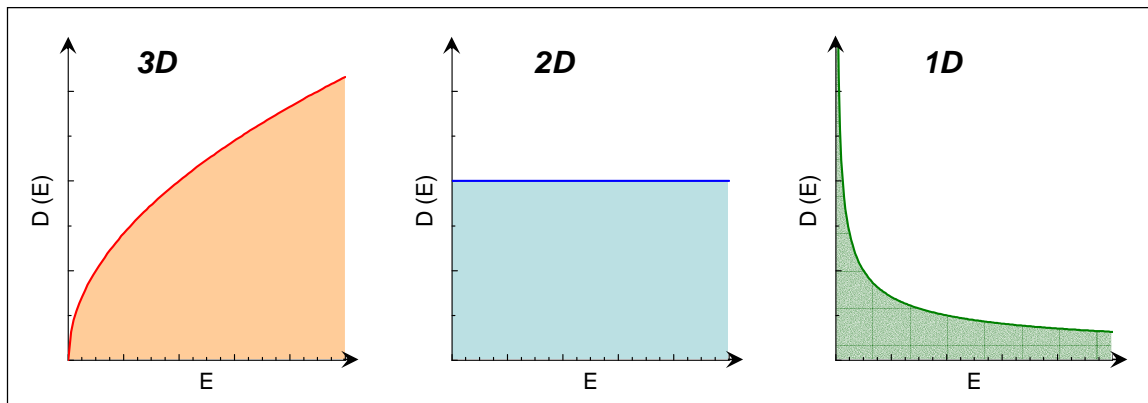


Abbildung 7.2: Zustandsdichte für ein 1D-, 2D- und 3D-Elektronengas.

und wir erhalten

$$D(E) = \frac{A}{2\pi} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right) E^0 = \text{const} \quad (\text{2D-Elektronengas}) . \quad (7.1.20)$$

Für ein eindimensionales Elektronengas gilt

$$Z(\mathbf{k})dk = 2 \frac{L}{(2\pi)} 2dk = D(E)dE \quad (7.1.21)$$

und wir erhalten

$$D(E) = \frac{L}{2\pi} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{1/2} E^{-1/2} \quad (\text{1D-Elektronengas}) . \quad (7.1.22)$$

Wir sehen, dass die Zustandsdichte für ein 3D-Elektronengas proportional zu \sqrt{E} , für ein 2D-Elektronengas konstant und für ein 1D-Elektronengas proportional zu $1/\sqrt{E}$ ist (siehe Abb. 7.2).

Die Fermi-Energie

Wir haben in den vorangegangenen Abschnitten die Eigenzustände und möglichen Wellenvektoren für ein einzelnes Elektron bestimmt. Wir wollen jetzt den Grundzustand eines Systems aus N nicht-wechselwirkenden Elektronen betrachten. Da für Elektronen das Pauli-Prinzip gilt, können jeweils nur zwei Elektronen mit entgegengesetztem Spin die Eigenzustände besetzen. Das bedeutet, dass wir die Eigenzustände von niedrigen Energien her kommend auffüllen müssen, bis wir alle N Elektronen untergebracht haben. Die höchste Energie, die wir dabei erreichen, ist die **Fermi-Energie** E_F .⁴ Die Fermi-Energie trennt bei $T = 0$ die besetzten Zustände ($E \leq E_F$) von den unbesetzten Zuständen ($E > E_F$).

Da die Flächen konstanter Energie für ein 3D-Elektronengas Kugeloberflächen sind, ergibt sich bei $T = 0$ im \mathbf{k} -Raum eine Kugel mit Radius k_F , die alle besetzten Zustände enthält. Wir nennen diese Kugel **Fermi-Kugel** (siehe Abb.7.3). Ihr Radius ist durch den **Fermi-Wellenvektor** k_F

⁴Benannt nach **Enrico Fermi**, geboren am 29. September 1901 in Rom, gestorben am 29. November 1945 in Chicago, Nobelpreis für Physik 1938.

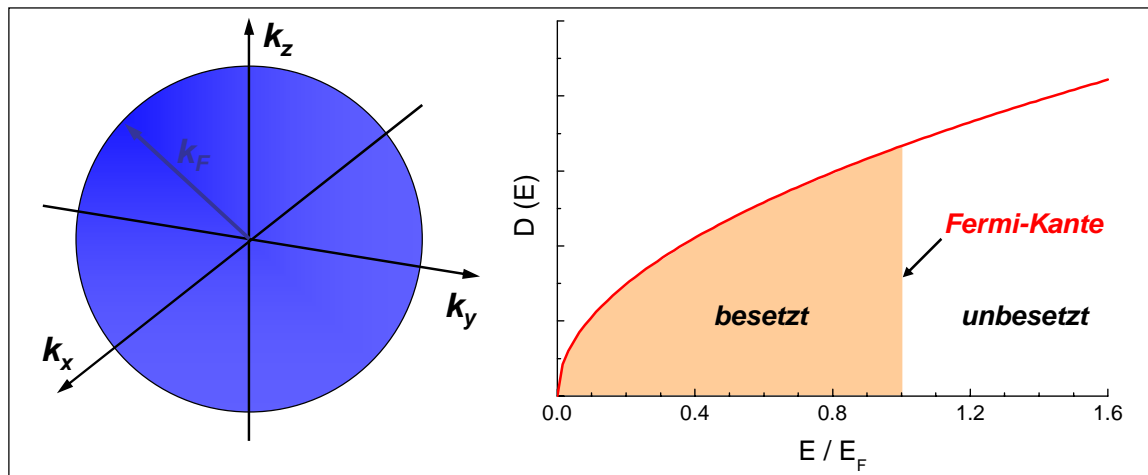


Abbildung 7.3: Fermi-Kugel und Zustandsdichte für ein 3D-Elektronengas bei $T = 0$. Die besetzten und unbesetzten Zustände sind durch eine scharfe Fermi-Kante getrennt.

gegeben, ihre Oberfläche bezeichnen wir als *Fermi-Fläche*. Die Größe des Fermi-Wellenvektors können wir leicht bestimmen, indem wir die Anzahl der möglichen Zustände innerhalb der Fermi-Kugel gleich der Elektronenzahl N setzen:

$$N = 2 \left(\frac{4}{3} \pi k_F^3 \right) \left(\frac{V}{(2\pi)^3} \right) . \quad (7.1.23)$$

Hierbei haben wir die Dichte $Z(\mathbf{k})$ der Zustände im \mathbf{k} -Raum benutzt, in der der Faktor 2 auftaucht, da ja jeder Zustand mit zwei Elektronen entgegengesetzten Spins besetzt werden kann. Lösen wir nach k_F auf und benutzen die Teilchendichte $n = N/V$,⁵ so erhalten wir⁵

$$k_F = (3\pi^2 n)^{1/3} . \quad (7.1.24)$$

Mit diesem Ausdruck können wir weitere Größen angeben

$$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3} \quad \text{Fermi-Energie} \quad (7.1.25)$$

$$T_F = \frac{E_F}{k_B} \quad \text{Fermi-Temperatur} \quad (7.1.26)$$

$$\lambda_F = \frac{2\pi}{k_F} \quad \text{Fermi-Wellenlänge} \quad (7.1.27)$$

$$v_F = \frac{p_F}{m} = \frac{\hbar k_F}{m} \quad \text{Fermi-Geschwindigkeit} . \quad (7.1.28)$$

Wir sehen, dass die Fermi-Energie nur von der Teilchendichte abhängt.⁶

⁵Vergleiche hierzu die analoge Ableitung des Debye-Wellenvektors (6.1.44) in Abschnitt 6.1.5. Beide Ausdrücke unterscheiden sich um den Faktor $2^{1/3}$, da wir bei dem Elektronensystem die Spin-Entartung vorliegen haben.

⁶Die Teilchendichte in Atomkernen (Protonen, Neutronen) ist wesentlich größer als die Elektronendichte in Festkörpern, deshalb ist die Fermi-Energie dort auch wesentlich höher.

| Metall | n (10^{22} cm^{-3}) | E_F (eV) | T_F (K) | k_F (10^8 cm^{-1}) | v_F (10^8 cm/s) |
|--------|--------------------------------------|---------------|--------------|-------------------------------------|----------------------------------|
| Li | 4.70 | 4.72 | 54 800 | 1.11 | 1.27 |
| Rb | 1.15 | 1.85 | 21 500 | 0.69 | 0.79 |
| Cu | 8.45 | 7.00 | 81 200 | 1.35 | 1.55 |
| Au | 5.90 | 5.51 | 63 900 | 1.20 | 1.38 |
| Be | 24.2 | 14.14 | 164 100 | 1.92 | 2.21 |
| Zn | 13.10 | 9.39 | 109 000 | 1.56 | 1.79 |
| Al | 18.06 | 11.63 | 134 900 | 1.74 | 2.00 |
| Pb | 13.20 | 9.37 | 108 700 | 1.57 | 1.81 |

Tabelle 7.1: Elektronendichte, Fermi-Energie, Fermi-Temperatur, Fermi-Wellenvektor und Fermi-Geschwindigkeit für einige Metalle.

Größenordnungen: Wir wollen kurz die Größenordnung der gerade eingeführten Größen abschätzen. In typischen Metallen ist die Elektronendichte $n \sim 5 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$. Damit erhalten wir folgende Größenordnungen:

$$k_F \simeq 10^8 \text{ cm}^{-1} \quad (7.1.29)$$

$$\lambda_F \simeq 1 \text{ \AA} \quad (7.1.30)$$

$$v_F \simeq 10^8 \text{ cm/s} \quad (7.1.31)$$

$$E_F \simeq 4 \text{ eV} \quad (7.1.32)$$

$$T_F \simeq 50\,000 \text{ K} \quad (7.1.33)$$

Zu beachten ist hierbei, dass die Wellenlänge der Elektronenwellen im Bereich von 1 \AA liegt und damit in der gleichen Größenordnung wie der Atomabstand im Festkörper liegt. Aufgrund unserer Diskussion in Kapitel 2 erwarten wir deshalb starke Beugungseffekte der Elektronenwellen im Festkörper. Ferner ist T_F wesentlich größer als die typischen Schmelztemperaturen von Festkörpern. Wir haben also immer den Fall $T \ll T_F$ vorliegen. In Tabelle 7.1 sind die Werte von E_F und T_F für einige Metalle angegeben.

Die Fermi-Geschwindigkeit spielt für ein Elektronengas eine ähnliche Rolle wie die thermische Geschwindigkeit der Teilchen in einem klassischen Gas. Da $T \ll T_F$ bzw. $E_{\text{th}} = k_B T \ll E_F$ ist allerdings die thermische Geschwindigkeit eines "klassischen Elektronengases" wesentlich kleiner als die Fermi-Geschwindigkeit. Während $v_F = \sqrt{2E_F/m} \simeq 10^8 \text{ cm/s}$, würde die thermische Geschwindigkeit eines klassischen Elektronengases bei 300 K nur $v_{\text{th}} = \sqrt{3E_{\text{th}}/m} \simeq 10^7 \text{ cm/s}$ betragen.

Wir wollen zuletzt noch die Zustandsdichte bei der Fermi-Energie angeben. Mit (7.1.18) und (7.1.25) erhalten wir

$$D(E_F) = \frac{3}{2} V \frac{n}{E_F} = \frac{3}{2} \frac{N}{E_F} \quad (7.1.34)$$

Häufig wird die Zustandsdichte auch pro Einheitsvolumen angegeben, so dass sie dann nur durch den Quotienten von Elektronendichte n und Fermi-Energie E_F bestimmt ist.

Gesamtenergie, Druck und Kompressibilität

Gesamtenergie: Die Gesamtenergie des Elektronensystems erhalten wir, indem wir die Energien der einzelnen Elektronen aufsummieren:

$$E_{\text{ges}} = 2 \sum_{k \leq k_F} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} . \quad (7.1.35)$$

Der Faktor 2 berücksichtigt hierbei wiederum die Spinentartung. Ähnlich wie wir es für die Gitterschwingungen getan haben, nehmen wir an, dass das Volumen V groß ist und deshalb die Zustände im \mathbf{k} -Raum sehr dicht liegen. Wir können dann die Summation durch eine Integration ersetzen, $\sum_k E(k) \rightarrow \int_k Z(k) E(k) d^3k$, und erhalten

$$E_{\text{ges}} = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{k \leq k_F} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} d^3k = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{k \leq k_F} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} 4\pi k^2 dk = \frac{V}{10\pi^2} \frac{\hbar^2}{m} k_F^5 . \quad (7.1.36)$$

Mit $n = N/V = k_F^3/3\pi^2$ erhalten wir für die Gesamtenergie pro Teilchen

$$\frac{E_{\text{ges}}}{N} = \frac{3}{5} E_F = \frac{3}{5} k_B T_F . \quad (7.1.37)$$

Im Gegensatz zu einem Gas klassischer Teilchen, für das die Energie pro Teilchen $\frac{3}{2}k_B T$ beträgt und damit für $T \rightarrow 0$ verschwindet, besitzt das Fermi-Gas selbst bei $T = 0$ eine große Energie pro Teilchen. Dies ist eine direkte Folge des Pauli-Verbots.

Druck: Der Druck, der von dem Elektronengas ausgeübt wird, ist

$$p = \left(\frac{\partial E_{\text{ges}}}{\partial V} \right)_{N=\text{const}} = \frac{2}{3} \frac{E_{\text{ges}}}{V} . \quad (7.1.38)$$

Hierbei haben wir den Ausdruck (7.1.25) für die Fermi-Energie verwendet. Da in die Fermi-Energie $n = N/V$ eingeht, ist diese vom Volumen abhängig.

Kompressibilität: Für die Kompressibilität κ bzw. den Bulk-Modul $B = 1/\kappa$ erhalten wir (vergleiche (3.2.25))⁷

$$\frac{1}{\kappa} = B = -V \left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_{T=\text{const}} = \frac{2}{3} n E_F . \quad (7.1.39)$$

⁷Es gilt $B = -V \left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_{T=\text{const}} = V \left(-\frac{2}{3} \frac{E_{\text{ges}}}{V^2} + \frac{2}{3V} \frac{\partial E_{\text{ges}}}{\partial V} \right) = \frac{2}{3} \frac{E_{\text{ges}}}{V} + \left(\frac{2}{3} \right)^2 \frac{E_{\text{ges}}}{V} = \frac{10}{9} \frac{E_{\text{ges}}}{V} = \frac{2}{3} n E_F$.

7.1.2 Fermi-Gas bei endlicher Temperatur

Wir haben das freie Elektronengas bisher nur für den Fall $T = 0$ betrachtet. Dabei waren alle Zustände bis $k = k_F$ besetzt und alle Zustände mit $k > k_F$ unbesetzt. Die besetzten und unbesetzten Zustände waren durch eine scharfe Fermi-Kante getrennt. Bei $T > 0$ erwarten wir thermische Anregungen, so dass einige Zustände für $k < k_F$ leer und einige für $k > k_F$ besetzt sein werden. Wir erwarten deshalb ein Aufweichen der scharfen Fermi-Kante. Wir müssen uns jetzt überlegen, wie sich die Elektronen auf die verfügbaren Zustände verteilen. Diese Frage müssen wir mit Hilfe der statistischen Physik beantworten. Die Vorgehensweise ist dabei ähnlich zu Kapitel 6. Dort haben wir die Besetzungswahrscheinlichkeit der Schwingungszustände (Phononen) mit der Bose-Einstein-Statistik beschrieben. Wir haben es jetzt allerdings nicht mehr mit Phononen, d.h. mit Bosonen (Teilchen mit ganzzahligem Spin) zu tun, für die diese Verteilungsfunktion adäquat ist. Elektronen besitzen einen halbzahligen Spin und sind deshalb Fermionen. Wir müssen deshalb ihre statistischen Eigenschaften mit der *Fermi-Dirac-Statistik*⁸ beschreiben.

Fermi-Dirac-Verteilung

Die Besetzungswahrscheinlichkeit der für die Teilchen eines Elektronengases zur Verfügung stehenden Zustände ist durch die *Fermi-Dirac-Verteilung*

$$f(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{k_B T}} + 1} \quad (7.1.40)$$

gegeben. Hierbei ist μ das so genannte *chemische Potenzial*, dessen Bedeutung wir weiter unten noch genauer diskutieren. Eine Ableitung der Fermi-Dirac-Verteilung ist in Anhang E gegeben.

Die Fermi-Dirac-Verteilungsfunktion gibt an, mit welcher Wahrscheinlichkeit ein Zustand mit der Energie E bei der Temperatur T besetzt ist. Sie ist in Abb. 7.4 grafisch dargestellt. Wir sehen, dass mit zunehmender Temperatur eine Umverteilung der Besetzung der Elektronenzustände von $E < E_F$ nach $E > E_F$ erfolgt. Da aber $k_B T \ll E_F$, ist der Anteil der Elektronen, die an dieser Umverteilung teilnehmen üblicherweise sehr klein. Bei Raumtemperatur ist für typische Metalle $k_B T/E_F \sim 10^{-2}$ und es nimmt nur etwa 1% aller Elektronen an der Umverteilung teil. Dies wird bei der späteren Diskussion der thermischen Eigenschaften oder der Transporteigenschaften des Elektronengases eine große Rolle spielen. In Abb. 7.4 gibt die rote Kurve ($\mu/k_B T = 200$) die Situation bei Raumtemperatur realistisch wieder. Die Aufweichung der Fermi-Funktion ist kaum zu erkennen, da der Bereich der Breite $k_B T$, über den die Aufweichung stattfindet, in diesem Fall nur $0.005 \cdot E/\mu$ beträgt.

Abb. 7.5 zeigt das Produkt aus Zustandsdichte und Fermi-Verteilungsfunktion für $T = 0$ und $T > 0$. Wir sehen wiederum, dass sich die Anzahl der besetzten Zustände nur innerhalb eines schmalen Intervalls der Breite $k_B T$ um $E/\mu = 1$ ändert. Bei $T = 0$ fällt $D(E)f(E)$ bei $E = \mu$ abrupt auf Null ab, während dieser Abfall bei endlichen Temperaturen über ein Energieintervall der Breite $\sim k_B T$ verschmiert ist.

⁸Paul Adrien Maurice Dirac, geboren am 08. August 1902 in Bristol, gestorben am 20. Oktober 1984 in Tallahassee, Nobelpreis für Physik 1933.

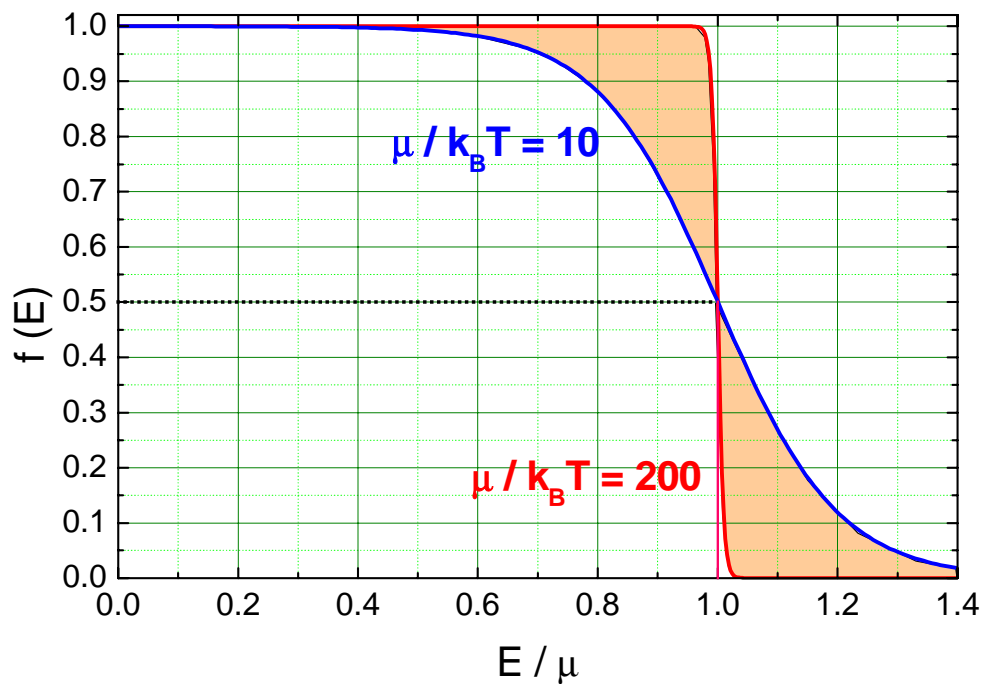


Abbildung 7.4: Grafische Darstellung der Fermi-Dirac Verteilungsfunktion in Abhängigkeit von der reduzierten Energie E/μ für $\mu/k_B T = 10$ und 200 . Für Metalle ist $\mu \simeq E_F \sim 5\text{eV} \sim 50\,000\text{K}$, so dass $\mu/k_B T = 200$ etwa den Verhältnissen bei Raumtemperatur entspricht. Erwärmt man das System, so werden die Zustände in den farbig markierten Bereichen von $E/\mu < 1$ nach $E/\mu > 1$ umverlagert.

7.1.3 Das chemische Potenzial

Im Gegensatz zum in Kapitel 6 behandelten Phononengas, bei dem die Teilchenzahl nicht erhalten war, haben wir es beim Elektronengas mit einer festen Teilchenzahl N zu tun. Deshalb taucht in der Verteilungsfunktion ein neuer Parameter, nämlich das chemische Potenzial μ auf. Für $T = 0$ erkennen wir aus (7.1.40) sofort, dass $f(E) = 0$ für $E > \mu$ und $f(E) = 1$ für $E \leq \mu$. Das heißt, es gilt

$$\mu(T = 0) = E_F . \quad (7.1.41)$$

Für beliebige Temperaturen können wir den Wert des chemischen Potenzials dadurch bestimmen, indem wir berücksichtigen, dass die Summe über alle Besetzungswahrscheinlichkeiten alle Elektronen gerade die Elektronenzahl N ergeben muss. Es muss also gelten

$$N = \int Z(\mathbf{k})f(E_{\mathbf{k}})d^3k = \int D(E)f(E)dE . \quad (7.1.42)$$

Bei der Lösung dieses Integrals verwendet man meist die **Sommerfeld-Entwicklung**. Der Grundgedanke ist dabei der, dass wegen $k_B T \ll \mu$ die Verteilungsfunktion $f(E)$ nur in einem schmalen Bereich der Breite $k_B T$ um $E \simeq \mu$ von der Verteilungsfunktion für $T = 0$ abweicht. Das Integral $\int_{-\infty}^{\infty} D(E)f(E)dE$ weicht also von dem Integral $\int_{-\infty}^{\mu} D(E)dE$ bei $T = 0$ nur in der Nähe von $E = \mu$ ab. Wir können deshalb eine Taylor-Entwicklung um $E = \mu$ vornehmen

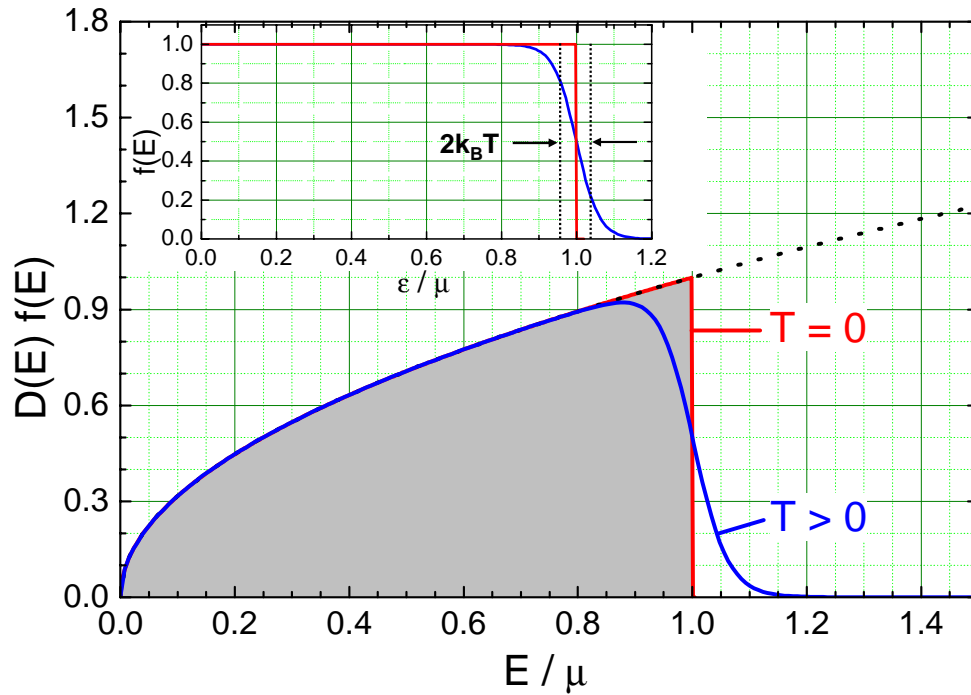


Abbildung 7.5: Zustandsdichte mal Besetzungswahrscheinlichkeit als Funktion der reduzierten Energie E/μ für $T = 0$ und $T > 0$. Beim Übergang von $T = 0$ zu $T > 0$ ändert sich in der Besetzung der Zustände nur innerhalb eines Energieintervalls der Breite $k_B T$ um $E/\mu = 1$. Das Inset zeigt die Fermi-Dirac-Verteilungsfunktionen für $T = 0$ und $T > 0$.

(Sommerfeld-Entwicklung) und erhalten:⁹

$$N = \int_0^{\infty} D(E)f(E)dE = \int_0^{\mu} D(E)dE + \sum_{n=1}^{\infty} (k_B T)^{2n} a_n \left(\frac{d^{2n-1} D(E)}{dE^{2n-1}} \right)_{E=\mu}. \quad (7.1.43)$$

Hierbei sind $a_n \sim 1$ dimensionslose Konstanten. Brechen wir die Reihenentwicklung nach dem 1. Glied ab, so erhalten wir

$$N = \int_0^{\mu} D(E)dE + (k_B T)^2 \frac{\pi^2}{6} \left(\frac{dD(E)}{dE} \right)_{E=\mu} + O\left(\frac{k_B T}{\mu} \right)^4. \quad (7.1.44)$$

Mit

$$\int_0^{\mu} D(E)dE = \int_0^{E_F} D(E)dE + \int_{E_F}^{\mu} D(E)dE \simeq \int_0^{E_F} D(E)dE + D(E_F)(\mu - E_F) \quad (7.1.45)$$

erhalten wir

$$\begin{aligned} N &= \int_0^{E_F} D(E)dE + \left[(\mu - E_F)D(E_F) + (k_B T)^2 \frac{\pi^2}{6} \left(\frac{dD(E)}{dE} \right)_{E=\mu} \right] \\ &= N(T = 0) + \tilde{N}. \end{aligned} \quad (7.1.46)$$

⁹siehe hierzu Anhang F oder *Solid State Physics*, N. W. Ashcroft, N. D. Mermin, CBS Publishing Asia Ltd. (1976), Anhang C.

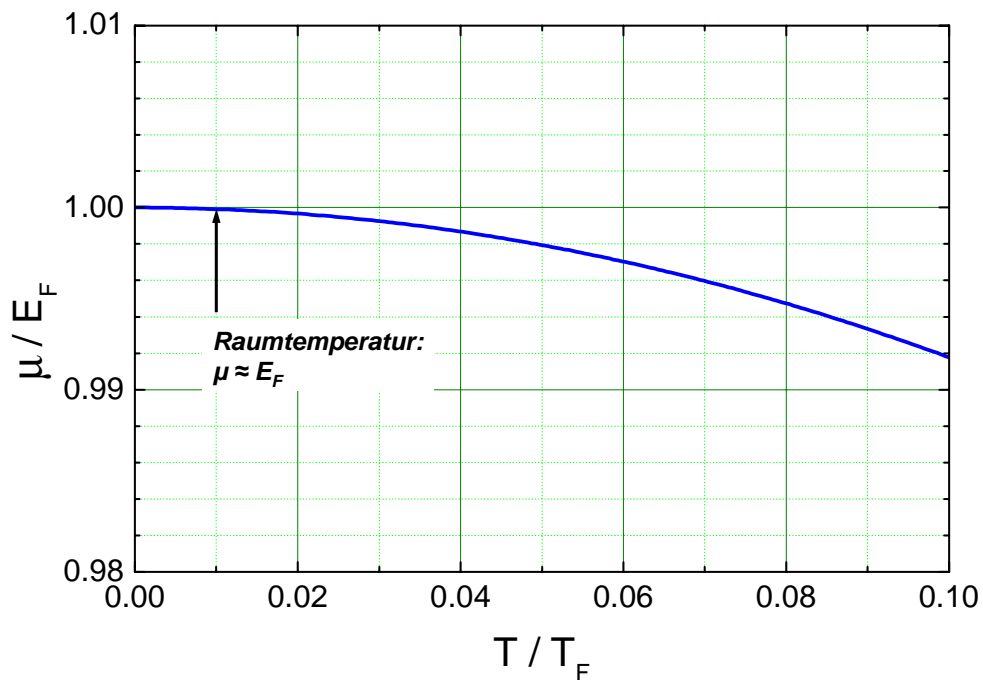


Abbildung 7.6: Temperaturabhängigkeit des chemischen Potentials eines Elektronengases. Bei Raumtemperatur ist für typische Metalle $T/T_F \simeq 10^{-2}$, so dass in guter Näherung $\mu \simeq E_F$.

Da die Teilchenzahl temperaturunabhängig sein muss, folgt sofort dass

$$\tilde{N} = 0 = \left[(\mu - E_F)D(E_F) + (k_B T)^2 \frac{\pi^2}{6} \left(\frac{dD(E)}{dE} \right)_{E=\mu} \right]. \quad (7.1.47)$$

Damit erhalten wir die Temperaturabhängigkeit des chemischen Potentials zu

$$\mu(T) = E_F - (k_B T)^2 \frac{\pi^2}{6} \frac{\left(\frac{dD(E)}{dE} \right)_{E=\mu}}{D(E_F)} \quad (7.1.48)$$

Mit $D(E) = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E}$ erhalten wir schließlich

$$\mu(T) = E_F \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{T}{T_F} \right)^2 \right] \quad (7.1.49)$$

Diese Abhängigkeit ist in Abb. 7.6 gezeigt. Da bei Raumtemperatur für typische Metalle $T/T_F \sim 10^{-2}$, können wir auch bei Raumtemperatur in guter Näherung $\mu(300 \text{ K}) \simeq E_F$ schreiben.

Anmerkung: Das chemische Potenzial stellt eine wichtige thermodynamische Größe dar. Bringen wir zwei thermodynamische Systeme in Kontakt und lassen Wärme und Teilchenaustausch zu, so befinden sich diese beiden Systeme genau dann im thermodynamischen Gleichgewicht, wenn $T_1 = T_2$ und $\mu_1 = \mu_2$ gilt. Das chemische Potenzial spielt also insbesondere bei Kontaktphänomenen (z.B. Diode, Halbleiterheterostrukturen, Metall-Halbleiter-Kontakt) eine wichtige Rolle. Der Wert von μ entspricht immer derjenigen Energie, die man aufbringen muss, um dem System ein weiteres Teilchen hinzuzufügen.

7.2 Spezifische Wärme

7.2.1 Theorie

Um die spezifische Wärme zu erhalten, müssen wir die innere Energie (entspricht Gesamtenergie) des Elektronengases als Funktion der Temperatur bestimmen. Für ein klassisches Elektronengas aus N Elektronen erwarten wir gemäß dem Gleichverteilungssatz pro kinetischem Freiheitsgrad den Beitrag $\frac{1}{2}k_B T$. Berücksichtigen wir noch die Spinartung, so erwarten wir für die Wärmekapazität

$$C_V^{\text{klassisch}} = \left. \frac{\partial \langle U \rangle}{\partial T} \right|_V = 2 \cdot N \cdot 3 \cdot \frac{1}{2} k_B = 3Nk_B . \quad (7.2.1)$$

Dieser klassische Wert, den wir nach dem Drude-Modell erwarten, ist jedoch um etwa den Faktor 100 größer als der gemessene Wert. Dies war einer der ersten Hinweise darauf, dass das klassische Drude-Modell die Situation nicht richtig beschreibt. Wir müssen eine quantenmechanische Beschreibung vornehmen und das Pauli-Prinzip berücksichtigen.

Die innere Energie eines Elektronengases erhalten wir ganz allgemein, indem wir über alle Energiezustände multipliziert mit deren Besetzungswahrscheinlichkeit aufsummieren:

$$U = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} E(\mathbf{k}) f(E_{\mathbf{k}}) . \quad (7.2.2)$$

Mit Hilfe der Zustandsdichte $D(E)$ können wir die Summation über alle \mathbf{k} durch eine Integration über die Energie ersetzen:

$$U = \int_0^{\infty} dE E D(E) f(E) . \quad (7.2.3)$$

Mit Hilfe der Sommerfeld-Entwicklung (siehe Anhang F) folgt

$$\begin{aligned} U &\simeq \int_0^{\mu} ED(E)dE + (k_B T)^2 \frac{\pi^2}{6} \left(\frac{d}{dE} [ED(E)] \right)_{E \simeq E_F} + \dots \\ &\simeq \int_0^{E_F} ED(E)dE + \int_{E_F}^{\mu} ED(E)dE + (k_B T)^2 \frac{\pi^2}{6} \left[E_F \frac{dD(E_F)}{dE} + D(E_F) \right] \\ &\simeq U(T=0) + E_F D(E_F) (\mu - E_F) + (k_B T)^2 \frac{\pi^2}{6} \left[E_F \frac{dD(E_F)}{dE} + D(E_F) \right] \\ &\simeq U(T=0) + E_F \left[D(E_F) (\mu - E_F) + (k_B T)^2 \frac{\pi^2}{6} \frac{dD(E_F)}{dE} \right] + (k_B T)^2 \frac{\pi^2}{6} D(E_F) . \end{aligned} \quad (7.2.4)$$

Der Term in eckigen Klammern entspricht gerade \tilde{N} in (7.1.47) und muss deshalb verschwinden. Somit erhalten wir

$$U = U(T=0) + (k_B T)^2 \frac{\pi^2}{6} D(E_F) . \quad (7.2.5)$$

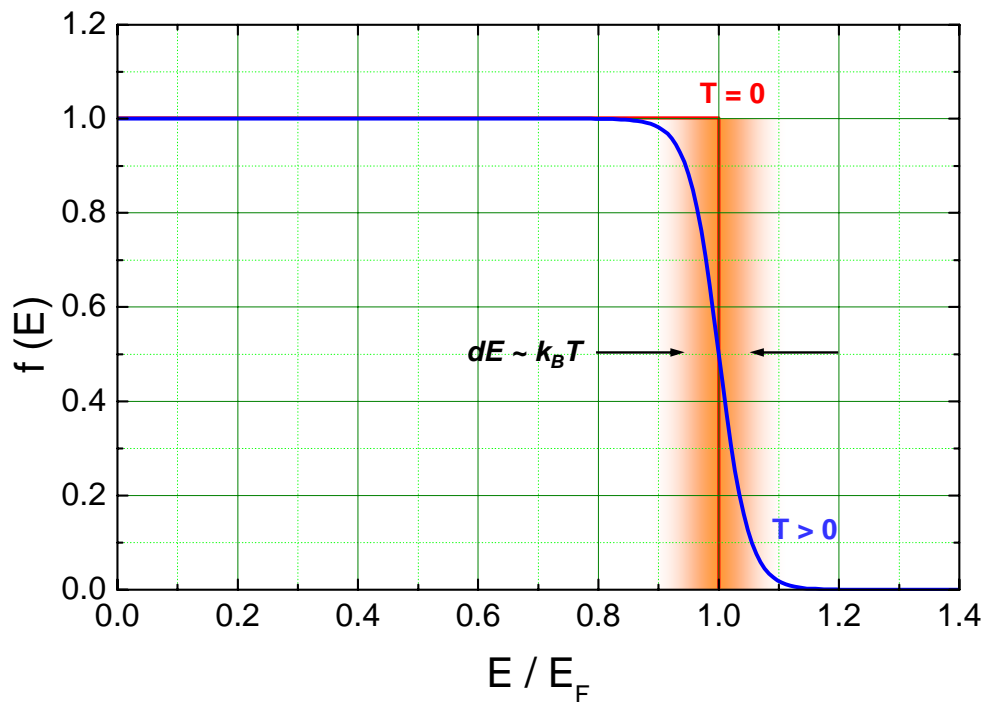


Abbildung 7.7: Plausibilitätsbetrachtung zur Wärmekapazität des Elektronengases. Gezeigt ist eine Fermi-Dirac-Verteilungsfunktion bei $T = 0$ (rot) und $T > 0$ (blau). Der schattierte Bereich zeigt den Energiebereich der Breite $k_B T$, aus dem die Elektronen zur Wärmekapazität beitragen können.

Für die Wärmekapazität erhalten wir damit

$$C_V = \left. \frac{\partial U}{\partial T} \right|_V = \frac{\pi^2}{3} k_B^2 T D(E_F) . \quad (7.2.6)$$

Mit der Zustandsdichte $D(E_F) = \frac{3}{2} \frac{N}{E_F}$ erhalten wir schließlich

$$C_V = \frac{\pi^2}{2} N k_B \frac{T}{T_F} = \gamma T \quad (7.2.7)$$

mit

$$\gamma = \frac{\pi^2}{3} k_B^2 D(E_F) . \quad (7.2.8)$$

Plausibilitätsbetrachtung: Um uns das obige Ergebnis anschaulich klar zu machen, betrachten wir Abb. 7.7. Erhöhen wir die Temperatur von $T = 0$ auf die Temperatur T , so erzeugen wir eine Umbesetzung der Elektronenzustände. An dieser Umbesetzung kann allerdings nur ein ganz kleiner Bruchteil der Elektronen mit Energien im Intervall $k_B T$ um die Fermi-Energie teilnehmen. Die Anzahl dieser Elektronen ist $N_{\text{th}} \simeq D(E_F) k_B T$. Jedes dieser Elektronen trägt etwa die Energie $k_B T$ zu U bei. Wir erwarten deshalb

$$U \simeq U(T = 0) + D(E_F) (k_B T)^2 \quad (7.2.9)$$

$$C_V = 2D(E_F) k_B^2 T = 3N k_B \frac{T}{T_F} . \quad (7.2.10)$$

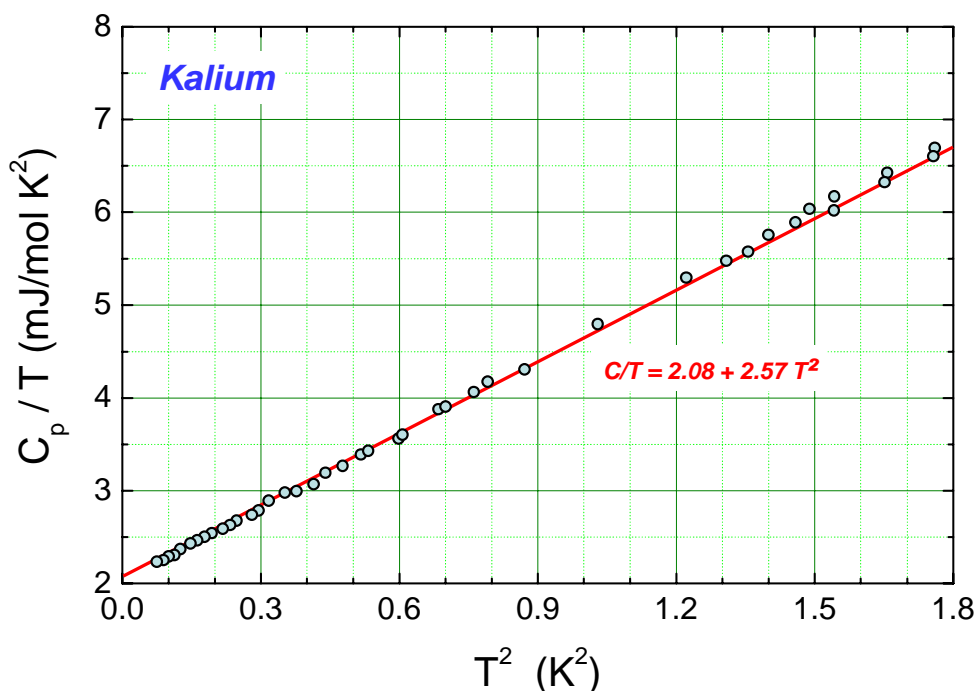


Abbildung 7.8: Spezifische Wärme von Kalium bei tiefen Temperaturen. Geplottet ist C_p/T gegen T^2 (Daten aus W.H. Lien, N.E. Phillips, Phys. Rev. 133, A1370 (1964)).

Dieses Ergebnis stimmt bis auf den Faktor $\pi^2/6$ mit dem Ergebnis (7.2.7) überein.

Wir sehen, dass die Wärmekapazität des Elektronengases proportional zu T zunimmt. Im Vergleich zum klassischen Ergebnis $C_V^{\text{klass}} = 3Nk_B$ taucht in (7.2.7) bzw. (7.2.10) noch der Faktor T/T_F auf. Das heißt, dass wir wegen $T \ll T_F$ nur einen kleinen Bruchteil der klassisch erwarteten Wärmekapazität erhalten. Die Ursache dafür ist das Pauli-Prinzip, das bei der klassischen Betrachtung natürlich außer Acht gelassen wurde. Es führt dazu, dass ein Großteil der Elektronen nicht zur Wärmekapazität beitragen kann. Ihre Freiheitsgrade sind quasi "eingefroren".

7.2.2 Experimentelle Ergebnisse

Messen wir die Wärmekapazität eines Metalls (gemessen wird immer C_p), so messen wir immer die Summe aus den Beiträgen des Gitters und des Elektronengassystems. Bei tiefen Temperaturen variiert der Gitteranteil mit T^3 und wir erwarten deshalb eine Temperaturabhängigkeit

$$C_p = \gamma \cdot T + A \cdot T^3 \quad . \quad (7.2.11)$$

Bei der Darstellung der experimentellen Daten wird deshalb häufig C/T gegen T^2 geplottet. Man erhält dann eine Gerade mit der Steigung A und dem Achsenabschnitt γ . Ein typisches Beispiel ist in Abb. 7.8 gezeigt, wo die spezifische Wärme von Kalium in einer C_p/T versus T^2 Auftragung gezeigt ist.

Der experimentell bestimmte Wert γ_{exp} stimmt für einige Metalle, insbesondere die Alkali-Metalle, gut mit dem nach (7.2.10) theoretisch erwarteten Wert γ_{theor} überein. Wie Tabelle 7.2 zeigt, gibt es aber vor allem für die $3d$ -Übergangsmetalle große Abweichungen zwischen Theorie und Experiment. Dies zeigt, dass das Modell der freien Elektronen für diese Metalle wohl

| Metall | γ_{exp} (10^{-3} J / mol K) | γ_{theor} (10^{-3} J / mol K) | $\gamma_{\text{exp}}/\gamma_{\text{theor}}$ |
|--------|---|---|---|
| Li | 1.63 | 0.749 | 2.18 |
| Na | 1.38 | 1.094 | 1.26 |
| K | 2.08 | 1.668 | 1.25 |
| Rb | 2.41 | 1.911 | 1.26 |
| Cs | 3.20 | 2.238 | 1.43 |
| Fe | 4.98 | 0.498 | 10 |
| Co | 4.98 | 0.483 | 10.3 |
| Ni | 7.02 | 0.458 | 15.3 |
| Cu | 0.695 | 0.505 | 1.38 |
| Ag | 0.646 | 0.645 | 1.00 |
| Au | 0.729 | 0.642 | 1.14 |
| Sn | 1.78 | 1.41 | 1.26 |
| Pb | 2.98 | 1.509 | 1.97 |

Tabelle 7.2: Vergleich zwischen experimentellem und nach (7.2.8) berechneten Wert des Koeffizienten γ der elektronischen spezifischen Wärme.

zu einfach ist. Für die $3d$ -Übergangsmetalle tragen die $3d$ -Elektronen zwar wesentlich zur Zustandsdichte beim Fermi-Niveau bei, diese Elektronen sind aber stark lokalisiert und können deshalb schlecht mit völlig delokalisierten, freien Elektronen beschreiben werden.

Die beobachteten Abweichungen zwischen γ_{exp} und γ_{theor} haben im Allgemeinen folgende Ursachen:

- Die Wechselwirkung der Elektronen mit dem durch die positiven Ionen gebildeten Kristallpotenzial. Wir werden in Kapitel 8 sehen, dass dies zu einer Bandmasse m^* der Elektronen führt, die wesentlich größer als m sein kann. Deshalb kann $\gamma \propto m^*$ auch wesentlich größer werden als der Wert, den wir mit der Masse m des freien Elektrons berechnen.
- Die Wechselwirkung der Elektronen mit den Phononen. Diese Wechselwirkung führt auch zu einer erhöhten effektiven Masse. Anschaulich können wir argumentieren, dass die Elektronen bei ihrer Bewegung durch das Kristallgitter dieses verformen. Sie müssen dann eine Deformation mitschleppen, die zu einer erhöhten effektiven Masse führt.
- Die Wechselwirkung der Elektronen untereinander führt in ähnlicher Weise zu einer erhöhten effektiven Masse.

Vertiefungsthema: Schwere Fermionen:

Mehrere intermetallische Verbindungen mit $4f$ - oder $5f$ -Elementen (z.B. UBe_{13} , UPt_3 , CeAl_3 , CeCu_2Si_2) zeigen γ -Werte, die mehrere Größenordnungen größer sind, als der nach (7.2.8) mit der freien Elektronenmasse m erwartete Wert. Die Ursache für diese extrem hohen Werte sind die f -Elektronen in diesen Substanzen. Da der Überlapp der Wellenfunktionen der f -Elektronen benachbarter Atome sehr gering ist, sind diese Elektronen stark lokalisiert. Bei

tiefen Temperaturen stehen die üblicherweise lokalisierten f -Elektronen an der Schwelle zur Delokalisierung. Die Elektronen sind dann aber nicht frei beweglich wie die s -Elektronen der Alkalimetalle, sondern spüren immer noch stark ihre Lokalisierungstendenz. Dieser Tatsache kann durch eine hohe effektive Masse $m^* \gg m$ Rechnung getragen werden. Typischerweise ist $m^*/m \sim 100 - 1000$. Man nennt diese Substanzen deshalb *Schwere Fermionen*.¹⁰

In dem Schwere-Fermionen-System CeCu_2Si_2 wurde im Jahre 1979 von **Frank Steglich**¹¹ Supraleitung entdeckt. Supraleiter zeichnen sich dadurch aus, dass sie den elektrischen Strom ohne Energieverlust tragen können. Diese Eigenschaft entsteht durch die koordinierte Bewegung zweier Elektronen, welche ein so genanntes Cooper-Paar bilden. In klassischen Supraleitern entsteht diese Koordination durch die elastische Kopplung der Elektronen an die Bewegung der Atome im Kristallgitter. Bei Schwere-Fermionen-Supraleitern vermutet man hingegen, dass die Bewegung der "schweren Elektronen" durch ihre Kopplung an die Bewegung der magnetischen Momente koordiniert wird. Dieser Mechanismus scheint nicht nur der Supraleitung in Metallen mit schweren Fermionen zugrunde zu liegen. Man vermutet vielmehr, dass in ihm auch der Schlüssel zum Verständnis der Hochtemperatur-Supraleiter zu finden ist. Deshalb werden heute Schwere-Fermionen-Systeme intensiv erforscht.

¹⁰Z. Fisk, J.L. Smith, H.R. Ott, *Physics Today* **38**, 20 (1985).

¹¹**Frank Steglich**, geboren am 14. März 1941 in Dresden.

7.3 Transporteigenschaften

Wir werden uns in diesem Abschnitt mit den Transporteigenschaften des freien Elektronengases beschäftigen. Dabei werden wir die Konzepte verwenden, die wir bereits in Abschnitt 6.4 bei der Behandlung des Wärmetransports durch die Phononen eingeführt haben, verwenden.

7.3.1 Elektrische Leitfähigkeit

Definition der elektrischen Leitfähigkeit

Die elektrische Leitfähigkeit σ eines Festkörpers ist definiert als Proportionalitätskonstante zwischen treibendem elektrischem Feld E und resultierender elektrischer Stromdichte J :¹²

$$\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E} . \quad (7.3.1)$$

Die Einheit der elektrischen Leitfähigkeit ist $1/\Omega\text{m}$ oder A/V m .

Transporttheorie

Um die elektrische Leitfähigkeit eines Festkörpers zu berechnen, müssen wir die elektrische Stromdichte \mathbf{J} als Funktion der mittleren Geschwindigkeit $\langle \mathbf{v} \rangle = \langle \hbar \mathbf{k} / m \rangle$ angeben. Die Stromdichte ergibt sich aus $\langle \mathbf{v} \rangle$ durch Multiplikation mit der Ladungsträgerdichte n und der Ladung e :¹³

$$\mathbf{J} = e n \frac{\hbar}{m} \langle \mathbf{k} \rangle = e \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \frac{\hbar \mathbf{k}}{m} . \quad (7.3.2)$$

Im thermischen Gleichgewicht ist $\langle \mathbf{k} \rangle = 0$ und es fließt kein elektrischer Strom. Eine endliche elektrische Stromdichte erhalten wir nur in einer Nichtgleichgewichtssituation. In Analogie zu (6.4.3) können wir schreiben:

$$\mathbf{J} = \frac{en\hbar}{m} \left[\langle \mathbf{k} \rangle - \langle \mathbf{k} \rangle^0 \right] = \frac{en\hbar}{m} \delta \mathbf{k} . \quad (7.3.3)$$

Wir sehen, dass wir nur dann eine endliche Stromdichte erhalten, wenn die Impulsverteilung der Elektronen von der Gleichgewichtsverteilung abweicht.

Wir müssen jetzt klären, wie sich die Impulsverteilung der Elektronen in einem bestimmten Raumgebiet ändern kann. Hierzu tragen erstens von außen wirkende Kräfte und zweitens Streuprozesse der Elektronen bei. Wir können also schreiben:

$$\frac{d\langle \mathbf{k} \rangle}{dt} = \left. \frac{\partial \langle \mathbf{k} \rangle}{\partial t} \right|_{\text{Kraft}} + \left. \frac{\partial \langle \mathbf{k} \rangle}{\partial t} \right|_{\text{Streu}} . \quad (7.3.4)$$

¹²Da $\mathbf{E} = -\nabla \phi_{\text{el}}$ taucht hier nicht wie bei der thermischen Leitfähigkeit ein Minuszeichen auf.

¹³Wir werden im Folgenden positive Elementarladungen mit e und negative mit $-e$ bezeichnen. Die Richtung der Stromdichte $\mathbf{J} = nev$ stimmt dann mit der technischen Stromrichtung überein.

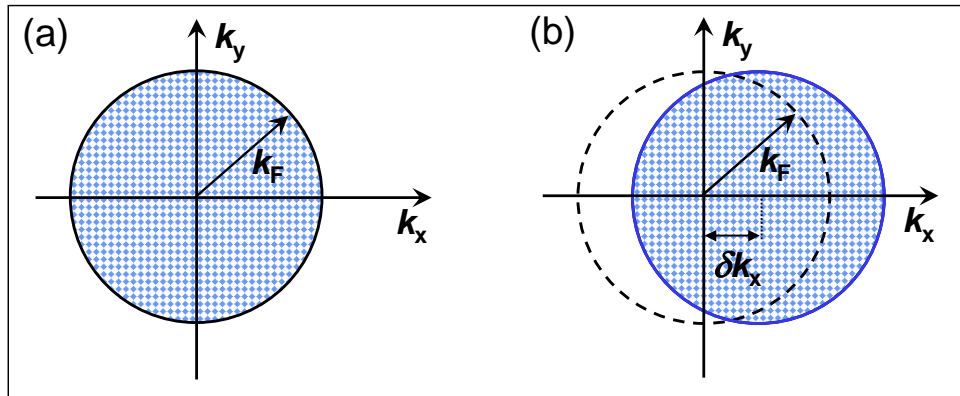


Abbildung 7.9: Die Fermi-Kugel umschließt alle besetzten Elektronenzustände im \mathbf{k} -Raum. (a) Für $\mathbf{F} = 0$ ist der Gesamtimpuls Null, da es zu jedem Wellenvektor \mathbf{k} einen entsprechenden Wellenvektor $-\mathbf{k}$ gibt. (b) Für $\mathbf{F} \neq 0$ wächst jeder Wellenvektor im Zeitintervall t um $\delta \mathbf{k} = \frac{\mathbf{F}t}{\hbar}$ an. Dies entspricht einer Verschiebung der Fermi-Kugel um $\delta \mathbf{k}$.

Wir werden im Folgenden nur stationäre Prozesse behandeln, d.h. Prozesse bei denen $\frac{d\langle \mathbf{k} \rangle}{dt} = 0$. Wir werden ferner für die zeitliche Änderung des mittleren Elektronenimpulses durch Streuprozesse einem einfachen einfachen *Relaxationsansatz*

$$\left. \frac{\partial \langle \mathbf{k} \rangle}{\partial t} \right|_{\text{Streu}} = -\frac{\langle \mathbf{k} \rangle - \langle \mathbf{k} \rangle^0}{\tau} = -\frac{\delta \mathbf{k}}{\tau} \quad (7.3.5)$$

machen. Das heißt, wir beschreiben die Änderung des mittleren Elektronenimpulses durch eine mittlere Streuzeit τ .

Die Änderung von $\langle \mathbf{k} \rangle$ durch eine äußere Kraft \mathbf{F} erhalten wir aus der Bewegungsgleichung

$$\mathbf{F} = m \frac{\partial \langle \mathbf{v} \rangle}{\partial t} = \hbar \frac{\partial \langle \mathbf{k} \rangle}{\partial t} \quad (7.3.6)$$

zu

$$\left. \frac{\partial \langle \mathbf{k} \rangle}{\partial t} \right|_{\text{Kraft}} = \frac{\mathbf{F}}{\hbar} \quad (7.3.7)$$

Durch Integration erhalten wir daraus

$$\langle \mathbf{k} \rangle(t) - \langle \mathbf{k} \rangle^0 = \delta \mathbf{k} = \frac{\mathbf{F}t}{\hbar} . \quad (7.3.8)$$

Das bedeutet, dass durch die Kraft \mathbf{F} die Wellenvektoren der Elektronenzustände innerhalb der Zeit t um $\delta \mathbf{k}$ geändert werden. Dies entspricht der Verschiebung der gesamten Fermi-Kugel um $\delta \mathbf{k}$ innerhalb der Zeit t (siehe hierzu Abb. 7.9). Schalten wir die äußere Kraft ab, so relaxiert $\delta \mathbf{k} \propto e^{-t/\tau}$ aufgrund von Streuprozessen wieder gegen Null.

Mit der Bedingung $\frac{d\langle \mathbf{k} \rangle}{dt} = 0$ folgt aus (7.3.4)

$$\delta \mathbf{k} = \frac{\mathbf{F}}{\hbar} \tau . \quad (7.3.9)$$

Die Kraft auf Elektronen im elektrischen Feld ist $\mathbf{F} = e\mathbf{E}$ und wir erhalten damit aus (7.3.3) das *Ohmsche Gesetz*

$$\mathbf{J} = \frac{ne^2\tau}{m} \mathbf{E} = ne\mu \mathbf{E} . \quad (7.3.10)$$

Hierbei ist

$$\mu = \frac{\mathbf{v}_D}{\mathbf{E}} = \frac{\mathbf{J}}{ne\mathbf{E}} = \frac{e\tau}{m} \quad (7.3.11)$$

die Beweglichkeit. Die Beweglichkeit gibt an, welche Driftgeschwindigkeit \mathbf{v}_D der Ladungsträger pro elektrische Feldstärke erzeugt wird. Für die elektrische Leitfähigkeit ergibt sich mit der Definition (7.3.1)

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m} = \frac{ne^2\ell}{mv_F} . \quad (7.3.12)$$

Hierbei haben wir die mittlere freie Weglänge $\ell = v_F\tau$ benutzt. Die mittlere freie Weglänge ist die Strecke, die ein Elektron innerhalb der mittleren Zeit τ zwischen zwei Streuprozessen zurücklegen kann. Zu beachten ist, dass zur Berechnung von ℓ die Geschwindigkeit der Elektronen, d.h. die Fermi-Geschwindigkeit $\mathbf{k}_F = \hbar\mathbf{k}_F/m$ verwendet werden muss, und nicht etwa die mittlere Driftgeschwindigkeit $\mathbf{v}_D = \hbar\delta\mathbf{k}/m$ der Elektronen. Dies liegt daran, dass nur Elektronen in einem schmalen Energieintervall der Breite $\sim k_B T$ um die Fermi-Energie an Streuprozessen teilnehmen können (siehe Abb. 7.10). Dies wird durch das Pauli-Prinzip verursacht. Da der maximale Energieübertrag bei einem Stoßprozess in der Größenordnung $k_B T \ll E_F$ liegt, können Elektronen weit unterhalb der Fermi-Energie keine Streuprozesse machen, da es keine freien Zustände gibt, in die sie gestreut werden könnten. Das Pauli-Prinzip verbietet ja eine Doppelbesetzung. Nur die Elektronen in dem Aufweichungsbereich der Breite $\sim k_B T$ der Fermi-Kugel, also diejenigen mit $v \simeq v_F$, finden freie Zustände und können gestreut werden.

Die Interpretation des Ergebnisses (7.3.12) für die elektrische Leitfähigkeit ist evident. Wir erwarten natürlich, dass die transportierte Ladungsmenge proportional zu ne ist. Der Faktor e/m muss auftauchen, da die Beschleunigung eines Elektrons im elektrischen Feld proportional zu e/m ist. Die Zeit τ bzw. die mittlere freie Weglänge $\ell = v_F\tau$ beschreibt schließlich das Zeit- bzw. Längenintervall, in dem ein Elektron durch das elektrische Feld beschleunigt werden kann, bevor es durch einen Streuprozess wieder abgebremst wird. Die mittlere freie Weglänge der Elektronen beträgt typischerweise einige 10 bis 100 nm, kann aber bei tiefen Temperaturen und sehr reinen Materialien bis in den cm-Bereich ansteigen.

Anmerkung zum Drude-Modell: Drude ging ursprünglich von einem klassischen freien Elektronengas aus und erhielt für dieses System ebenfalls das Ergebnis (7.3.12). Die mittlere thermische Geschwindigkeit $v_{\text{th}} = \sqrt{3k_B T/m}$ in einem solchen klassischen Gas ist bei Raumtemperatur allerdings nur etwa 10^7 cm/s und damit um mehr als eine Größenordnung kleiner als die Fermi-Geschwindigkeit. Da man durch Messung von σ die Streuzeit τ bestimmt, berechnet man mit $\ell = v_{\text{th}}\tau$ im Rahmen des Drude-Modells eine sehr kleine mittlere freie Weglänge im Bereich von nur 1 bis 10 Å. Drude nahm deshalb an, dass die Elektronen an den positiven Atomrümpfen gestreut werden. Diese Vorstellung ist natürlich falsch. Wir werden in Kapitel 8 sehen, dass die freie Weglänge für Elektronen (bei $T = 0$) in einem perfekten Kristallgitter unendlich groß wird. Streuprozesse kommen nur aufgrund von Abweichungen von

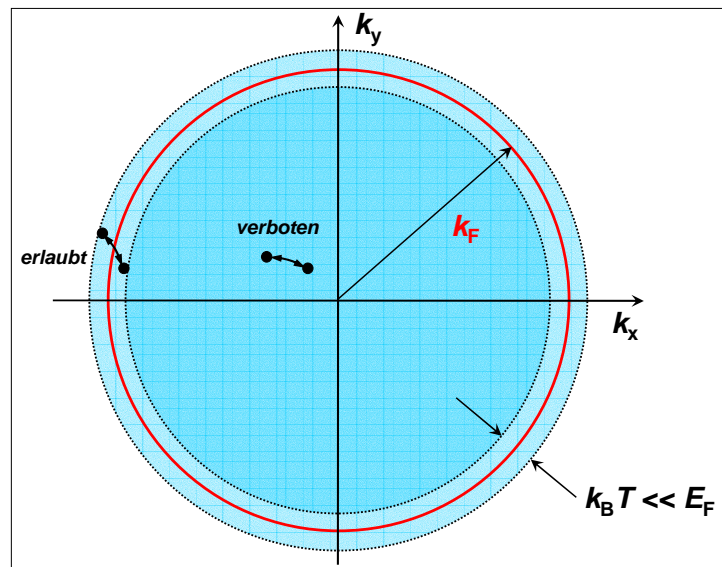


Abbildung 7.10: Zur Veranschaulichung des Energiebereichs derjenigen Elektronen, für die Streuprozesse möglich sind. Streuprozesse weit innerhalb der Fermi-Kugel sind durch das Pauli-Prinzip verboten. Nur Elektronen im Energiebereich der Breite $\sim k_B T$ um die Fermi-Energie können an Streuprozessen teilnehmen.

der perfekten periodischen Struktur zustande. Wir wollen schließlich darauf hinweisen, dass im Rahmen des Drude-Modells (kein Pauli-Prinzip) alle Elektronen gestreut werden können, während bei Berücksichtigung des Pauli-Prinzips nur ein kleiner Teil T/T_F der Elektronen nahe an der Fermi-Kante streuen kann.

Temperaturabhängigkeit der elektrischen Leitfähigkeit

Die typische Temperaturabhängigkeit des spezifischen elektrischen Widerstands $\rho = 1/\sigma$ von Metallen ist in Abb. 7.11 skizziert. Die einzige temperaturabhängige Größe in (7.3.12) ist die Streuzeit τ bzw. die mittlere freie Weglänge ℓ . Um die beobachtete Temperaturabhängigkeit von ρ zu verstehen, müssen wir die Streuprozesse der Elektronen betrachten. In einfachen Metallen dominieren folgende Streuprozesse:

1. Streuung an Phononen
2. Streuung an Defekten und Verunreinigungen
3. Streuung an der Probenoberfläche

Wirken in einem Material mehrere Streuprozesse parallel, so kann die gesamte Streuzeit mit Hilfe der empirischen *Matthiessen-Regel* bestimmt werden, nach der sich die Streuraten addieren:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_1} + \frac{1}{\tau_2} + \frac{1}{\tau_3} + \dots \quad (7.3.13)$$

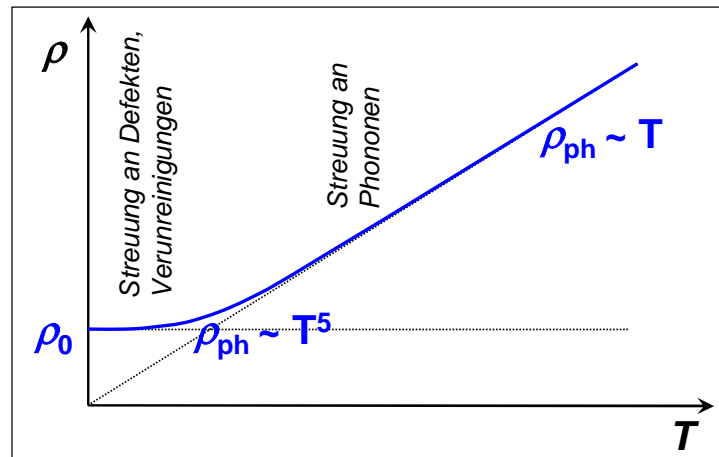


Abbildung 7.11: Temperaturabhängigkeit des elektrischen Widerstands. Bei tiefen Temperaturen dominiert üblicherweise die Streuung an Verunreinigungen und Defekten, bei hohen Temperaturen die Streuung an Phononen.

Elektron-Phonon-Streuung: Die Streurrate der Elektron-Phonon-Streuung ist proportional zur mittleren Anzahl $\langle n \rangle$ der Phononen. Diese ist proportional zu T^3 bei tiefen Temperaturen ($T \ll \Theta_D$) und proportional zu T für hohe Temperaturen ($T \gg \Theta_D$). Wir erwarten deshalb folgende Temperaturabhängigkeit des elektrischen Widerstands:

1. Hohe Temperaturen: $T \gg \Theta_D$:

Wegen $\frac{1}{\tau_{\text{ph}}} \propto \langle n \rangle \propto \frac{T}{\Theta_D}$ erwarten wir

$$\rho_{\text{ph}} \propto T. \quad (7.3.14)$$

2. Tiefe Temperaturen: $T \ll \Theta_D$:

Innerhalb eines Debye-Modells (Zustandsdichte $D(\omega_q) \propto \omega_q^2$) erhalten wir für die Zahl der Phononen $\int_0^{\omega^*} D(\omega_q) d\omega_q \propto \omega^{*3}$. Mit $\hbar\omega^* \simeq k_B T$ erhalten wir $\langle n \rangle \propto T^3$. Wir erwarten deshalb $\frac{1}{\tau_{\text{ph}}} \propto \langle n \rangle \propto T^3$ und damit $\rho_{\text{ph}} \propto T^3$. Im Experiment beobachtet man allerdings $\rho_{\text{ph}} \propto T^5$. Dies liegt daran, dass wir zusätzlich noch einen Gewichtungsfaktor zur Bewertung der Streuprozesse berücksichtigen müssen. Betrachten wir die Streuung um einen Winkel ϑ zwischen den Wellenvektoren k und k' vor und nach der Streuung, so sehen wir aus Abb. 7.12, dass die Geschwindigkeitskomponente in der ursprünglichen Richtung $v - \delta v = v \cos \vartheta$ ist. Die verlorene relative Driftgeschwindigkeit ist also $\delta v/v = 1 - \cos \vartheta$. Da die Streuung um kleine Winkel nur kleine relative Impulsüberträge liefert, muss der zusätzliche Gewichtungsfaktor $(1 - \cos \vartheta)$ berücksichtigt werden. Für kleine ϑ (tiefe Temperaturen) gilt $(1 - \cos \vartheta) \simeq \vartheta^2 \propto q^2 = \omega_q^2/v_s^2$, wobei v_s die Schallgeschwindigkeit ist. Wegen $\omega_q = k_B T/\hbar$ ist $(1 - \cos \vartheta) \propto T^2$ und wir erhalten insgesamt

$$\rho_{\text{ph}} \propto T^5. \quad (7.3.15)$$

Streuung an Defekten und Verunreinigungen: Die Anzahl der Defekte und Verunreinigungen in einer Probe ist temperaturunabhängig. Deshalb erwarten wir einen temperaturunabhängigen Beitrag

$$\rho_0 = \text{const.} \quad (7.3.16)$$

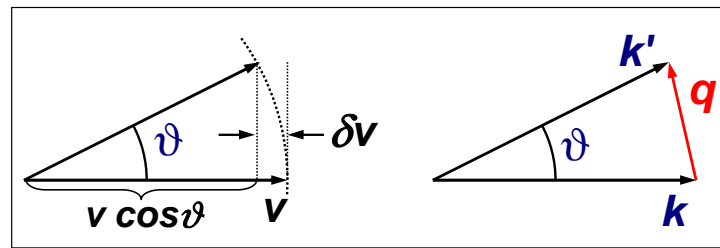


Abbildung 7.12: Zur Veranschaulichung des Gewichts-faktors bei der Bewertung von Streuprozessen.

zum elektrischen Widerstand. Diesen Beitrag können wir bei sehr tiefen Temperaturen beobachten, wenn der Beitrag durch die Elektron-Phonon-Streuung sehr klein wird. Man nennt diesen temperaturunabhängigen Beitrag auch den *Restwiderstand*. In sehr reinen einkristallinen Proben kann die mittlere freie Weglänge aufgrund von Defekten und Verunreinigungen größer als die Probengröße werden. In diesem Fall müssen wir einen weiteren, temperaturunabhängigen Streuprozess berücksichtigen, nämlich die Streuung an der Probenoberfläche.

In Abb. 7.13 sind einige experimentelle Daten zur Temperaturabhängigkeit des elektrischen Widerstands gezeigt. Fügt man einem reinen Metall Verunreinigungen hinzu, so nimmt der Restwiderstand etwa proportional zum Verunreinigungsgrad zu (siehe Abb. 7.13a und b). Die beobachteten $\rho(T)$ Kurven werden dann einfach um den höheren Restwiderstand ρ_0 nach oben verschoben. Als Funktion der Temperaturen erkennt man den Übergang von $\rho = \rho_0$ bei tiefen Temperaturen über einen $\rho \propto T^5$ Bereich zur linearen Temperaturabhängigkeit bei hohen Temperaturen. Normiert man die Temperaturachse auf die Debye-Temperatur Θ_D und die Widerstandsachse auf $\rho(\Theta_D)$, so erhält man für unterschiedliche Metalle das in Abb. 7.13c gezeigte universelle Temperaturverhalten.

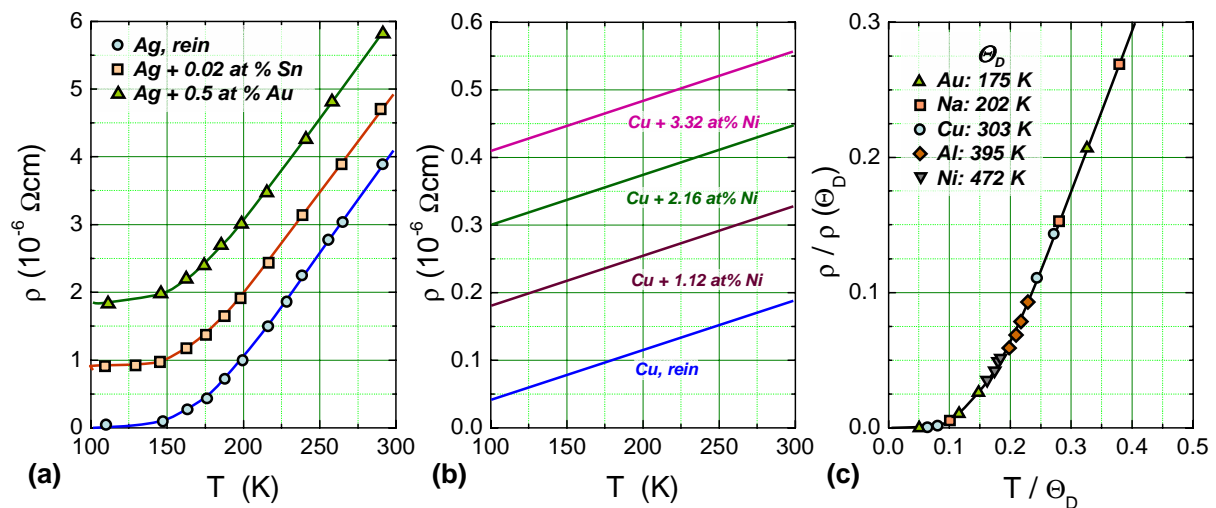


Abbildung 7.13: Temperaturabhängigkeit des spezifischen elektrischen Widerstands von verschiedenen Metallen: (a) Ag mit unterschiedlichen Verunreinigungskonzentrationen, (b) Cu mit Ni-Verunreinigung (nach J. Linde, Ann. Phys. 5, 15 (1932)) und (c) reduzierter Widerstand gegen reduzierte Temperatur für unterschiedliche reine Metalle.

Eine Größe, die sich gut für die Charakterisierung der Reinheit eines elektrisch leitenden Materials eignet, ist das so genannte *Restwiderstandsverhältnis* RRR (residual resistance ratio):

$$\text{RRR} = \frac{\rho(300\text{ K})}{\rho_0} . \quad (7.3.17)$$

Für reine Materialien wird der Widerstand bei 300 K durch die Elektron-Phonon-Streuung dominiert. Gleichzeitig wird der Restwiderstand ρ_0 sehr klein und man erhält sehr hohe RRR-Werte von bis zu 10^6 . Bei Legierungen wird dagegen auch bei 300 K der Widerstand durch die Verunreinigungsstreuung dominiert und man erhält $\text{RRR} \simeq 1$.

7.3.2 Thermische Leitfähigkeit

Wie bei der Diskussion des Wärmetransports im Kristallgitter in Abschnitt 6.4 definieren wir die Wärmeleitfähigkeit κ des Elektronengases als Proportionalitätskonstante zwischen treibendem Temperaturgradient ∇T und resultierender Wärmestromdichte \mathbf{J}_h :

$$\mathbf{J}_h = -\kappa \nabla T . \quad (7.3.18)$$

In völliger Analogie zur thermischen Leitfähigkeit des Phononengases erhalten wir für das Elektronengas die thermische Leitfähigkeit (vergleiche (6.4.9))

$$\kappa = \frac{1}{3} c_V v^2 \tau . \quad (7.3.19)$$

Setzen wir den Ausdruck $c_V = 3nk_B \frac{T}{T_F}$ für die spezifische Wärme und $v^2 = v_F^2 = 2E_F/m = 2k_B T_F/m$ für die Geschwindigkeit ein, so erhalten wir

$$\kappa = \frac{\pi^2}{3} \frac{nk_B^2 \tau}{m} T . \quad (7.3.20)$$

In Metallen überwiegt die thermische Leitfähigkeit der Elektronen üblicherweise die thermische Leitfähigkeit des Kristallgitters deutlich. Nur in stark verunreinigten oder ungeordneten Metallen wird die Streuzeit τ sehr klein und die Wärmeleitfähigkeit des Gitters kann in die gleiche Größenordnung kommen wie diejenige des Elektronensystems. In Tabelle 7.3 sind die experimentellen Werte von $\kappa(272 \text{ K})$ für einige Metalle aufgelistet.

Das Wiedemann-Franz-Gesetz

Vergleichen wir das Ergebnis (7.3.20) mit demjenigen für die elektrische Leitfähigkeit, so sehen wir, dass das Verhältnis von thermischer und elektrischer Leitfähigkeit des Elektronensystems direkt proportional zur Temperatur ist:

$$\frac{\kappa}{\sigma} = \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k_B}{e} \right)^2 T . \quad (7.3.21)$$

Diesen Zusammenhang bezeichnet man als **Wiedemann-Franz-Gesetz**. Voraussetzung ist, dass die gleichen Streuprozess zum elektrischen und thermischen Widerstand beitragen. Wäre dies nicht der Fall, so würde in den Ausdrücken für κ und σ eine unterschiedliche Streuzeit eingehen.

| Metall | κ (W/cm K) | L (10^{-8} W/ Ω K 2) | Metall | κ (W/cm K) | L (10^{-8} W/ Ω K 2) |
|--------|----------------------|---|--------|----------------------|---|
| Al | 2.38 | 2.14 | Na | 1.38 | 2.12 |
| Ag | 4.18 | 2.31 | Pb | 0.38 | 2.47 |
| Au | 3.10 | 2.35 | Pt | — | 2.51 |
| Cd | 1.00 | 2.42 | Sn | 0.64 | 2.52 |
| Cu | 3.85 | 2.23 | Nb | 0.52 | 2.90 |
| Fe | 0.80 | 2.61 | Sb | 0.64 | 2.57 |
| In | 0.88 | 2.58 | W | — | 3.04 |
| Mo | — | 2.61 | Zn | 1.13 | 2.31 |

Tabelle 7.3: Experimentelle Werte der thermischen Leitfähigkeit und der Lorenz-Zahl von Metallen bei 272 K (Quelle: G.W.C. Kaye, T.H. Laby, *Table of Physical and Chemical Constants*, Langmans Green, London (1966)).

Die Größe $\kappa/\sigma T$ ist nach (7.3.21) temperaturunabhängig. Sie wird als *Lorenz-Zahl* bezeichnet:

$$L \equiv \frac{\kappa}{\sigma \cdot T} = \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k_B}{e} \right)^2 = 2.44 \times 10^{-8} \text{ W}/\Omega\text{K}^2 . \quad (7.3.22)$$

Wir sehen, dass gute elektrische Leiter auch gute Wärmeleiter und umgekehrt sind. In Tabelle 7.3 sind die Lorenz-Zahlen einiger Metalle aufgelistet. Sie stimmen gut mit dem theoretischen Wert überein.

Experimentell findet man, dass das Wiedemann-Franz-Gesetz immer nur bei hohen Temperaturen (größenordnungsmäßig etwa 100 K) gut erfüllt ist und auch der nach (7.3.22) erwartete Wert der Lorenz-Zahl gemessen wird. Zu tiefen Temperaturen hin nimmt dann allerdings der Wert der Lorenz-Zahl ab und wird bei tiefen Temperaturen wieder konstant. Grund für diese Temperaturabhängigkeit ist eine unterschiedliche Wichtung der Streuprozesse beim elektrischen und thermischen Transport. Für den elektrischen Widerstand kommt es vor allem auf eine effektive Impulsrelaxation der Elektronen an, da der durch das elektrische Feld erzeugte Zusatzimpuls $\delta\mathbf{k}$ abgegeben werden muss. Dies ist am effektivsten durch Prozesse möglich, bei denen der Impuls von $\mathbf{k} \simeq +\mathbf{k}$ nach $\mathbf{k} \simeq -\mathbf{k}$ geändert wird. Diese Prozesse führen zwar auch zu einem thermischen Widerstand. Allerdings kommt es für den thermischen Widerstand vor allem auf eine effektive Energierelaxation an. Ein Temperaturgradient erzeugt nämlich keinen Zusatzimpuls der Elektronen, sondern eine Zusatzenergie. Für eine Energierelaxation sind aber auch Prozesse mit kleiner Impulsänderung (z.B. von $k_F + \delta k$ nach $k_F - \delta k$ mit $\delta k \ll k_F$) effektiv. Diese Prozesse, die vor allem bei tiefen Temperaturen wichtig sind, da die Phononenzustände mit hohen Impulsen ausfrieren, tragen wenig zum elektrischen Widerstand bei. Dies erklärt die Abnahme der Lorenz-Zahl mit abnehmender Temperatur.

Anmerkung zum Drude-Modell: Wir wollen hier nochmals eine Anmerkung zum klassischen Drude-Modell machen. Ein großer Erfolg dieses Modells war, dass es das Wiedemann-Franz-Gesetz richtig vorhersagte. Dies basierte allerdings auf dem Zufall, dass sich zwei fehlerhafte Annahmen gerade gegenseitig kompensiert haben. Im Drude-Modell wird im Ausdruck $\kappa = \frac{1}{3} c_V v^2 \tau$ der klassische Dulong-Petit-Wert $c_V = \frac{3}{2} n k_B$ anstelle des richtigen Werts

$c_v = \frac{\pi^2}{2} n k_B \frac{T}{T_F}$ eingesetzt, d.h. ein um etwa den Faktor T/T_F zu großer Wert. Dies wird aber wiederum kompensiert, indem die thermische Geschwindigkeit $v_{\text{th}}^2 = 2k_B T/m$ anstelle der richtigen Fermi-Geschwindigkeit $v_F^2 = 2k_B T_F/m$, also ein um etwa T/T_F zu niedriger Wert verwendet wird. Dadurch wird im Drude-Modell durch Zufall der richtige Ausdruck für die thermische Leitfähigkeit und somit auch das Wiedemann-Franz-Gesetz erhalten.

Temperaturabhängigkeit der thermischen Leitfähigkeit

Wir wollen kurz die Temperaturabhängigkeit der elektronischen thermischen Leitfähigkeit diskutieren. Mit Hilfe des Wiedemann-Franz-Gesetzes folgt diese sofort aus der Temperaturabhängigkeit der elektrischen Leitfähigkeit. Mit $\rho = \rho_0 = \text{const}$ bei sehr tiefen Temperaturen, $\rho \propto T^5$ für $T \ll \Theta_D$ und $\rho \propto T$ für $T \gg \Theta_D$ erhalten wir

$$\kappa \propto \frac{1}{\rho} T \propto \begin{cases} T & \text{für } T \ll \Theta_D \\ T^{-4} & \text{für } T \ll \Theta_D \\ \text{const.} & \text{für } T \gg \Theta_D \end{cases} . \quad (7.3.23)$$

Wir erwarten also, dass κ von hohen Temperaturen kommend zunächst konstant ist und dann genügend weit unterhalb von Θ_D mit abnehmender Temperatur stark ansteigt, ein Maximum durchläuft und bei sehr tiefen Temperaturen, bei denen die Verunreinigungsstreuung dominiert, proportional zu T abnimmt. Wir erhalten wie bei der Wärmeleitfähigkeit des Gitters ein Maximum der thermischen Leitfähigkeit, dessen Höhe und Temperatur von der Reinheit der Probe abhängt. Dieses Verhalten ist in Abb. 7.14 für reine Metalle wie Kupfer oder Aluminium zu sehen. Sehr reine Proben (z.B. hochreines Kupfer) haben ein sehr ausgeprägtes Maximum bei tieferen, sehr verunreinigte Proben ein flaches bei höheren Temperaturen. Für Legierungen wird das Maximum völlig unterdrückt, da die mittlere freie Weglänge für den gesamten Temperaturbereich durch die temperaturunabhängige Verunreinigungsstreuung dominiert wird und sehr klein ist. Für sehr reine Proben werden maximale Werte für κ von mehr als 10 000 W/m K erreicht.

Die elektronische Wärmeleitfähigkeit von Metallen ist im Allgemeinen um etwa den Faktor 100 größer als die Wärmeleitfähigkeit des Gitters, so dass letztere experimentell schwierig zu beobachten ist. Der Grund dafür liegt in der sehr effektiven Elektron-Phonon-Streuung. Diese führt in Metallen zu einer im Vergleich mit Isolatoren viel kleineren mittleren freien Weglänge und damit zu einem sehr kleinen Beitrag der Phononen zur Wärmeleitfähigkeit. Die in Isolatoren dominierende Phonon-Phonon-Streuung ist in Metallen im Vergleich zur Elektron-Phonon-Streuung vernachlässigbar klein. Der Beitrag des Gitters zur Wärmeleitfähigkeit von Metallen kann nur dann beobachtet werden, wenn der elektronische Beitrag stark unterdrückt wird. Dies ist z.B. in Legierungen der Fall, in denen die Elektronen stark an Fremdatomen und Defekten gestreut werden, so dass sie wenig zur Wärmeleitfähigkeit beitragen können.

7.3.3 Thermokraft

Bei der Herleitung der Wärmeleitfähigkeit haben wir angenommen, dass kein Teilchentransport stattfindet. Betrachten wir den in Abb. 7.15 gezeigten eindimensionalen metallischen Leiter, dessen Temperatur T_1 am einen Ende größer ist als die Temperatur T_2 am anderen, so erhalten wir im Mittel eine Elektronenbewegung von T_1 nach T_2 . Da die Elektronen aber den

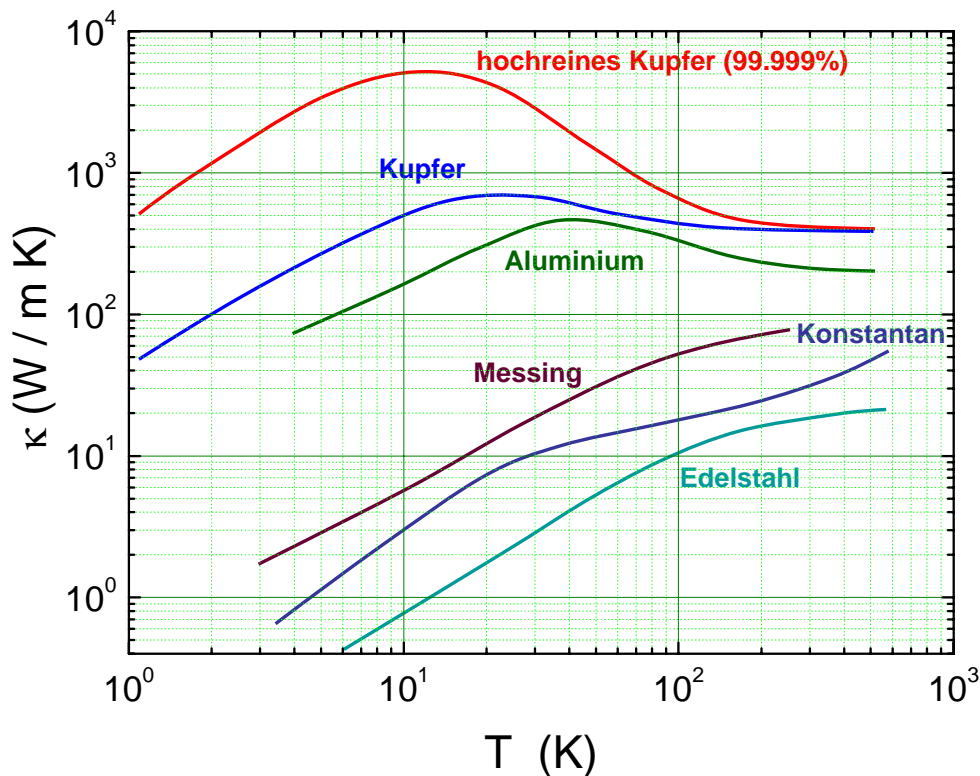


Abbildung 7.14: Temperaturabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit von reinen Metallen (Cu, Al) und Legierungen (Messing, Konstantan, Edelstahl).

Leiter nicht verlassen können, sammeln sie sich bei T_2 an, was zu einem elektrischen Feld E_x parallel zum Temperaturgradienten dT/dx führt. Wir definieren nun

$$\mathbf{E} \equiv S \nabla T . \quad (7.3.24)$$

Die Größe S bezeichnen wir als *Thermokraft*.

Um einen Ausdruck für die Thermokraft abzuleiten, betrachten wir unser eindimensionales Modell in Abb. 7.15. Offensichtlich ist wegen $v_1 \neq v_2$ der Mittelwert der Teilchengeschwindigkeit bei x_0 nicht mehr Null. Aufgrund des Temperaturgradienten erhalten wir eine mittlere Diffusionsgeschwindigkeit in x -Richtung:

$$v_{\text{diff}} = \frac{v_1 + v_2}{2} = \frac{1}{2} [v(x - v\tau) - v(x + v\tau)] . \quad (7.3.25)$$

Entwickeln wir $v[T(x)]$ um x_0 und berücksichtigen nur den Term erster Ordnung, d.h. $v[T(x)] \simeq v(x_0) + \frac{dv}{dx}(x - x_0)$, so erhalten wir

$$\begin{aligned} v_{\text{diff}} &= \frac{1}{2} \left[v(x_0) + \frac{dv}{dx}(-v\tau) - v(x_0) - \frac{dv}{dx}(v\tau) \right] \\ &= -\tau v \frac{dv}{dx} = -\tau \frac{d}{dx} \left(\frac{v^2}{2} \right) = -\frac{\tau}{2} \frac{dv^2}{dT} \frac{dT}{dx} . \end{aligned} \quad (7.3.26)$$

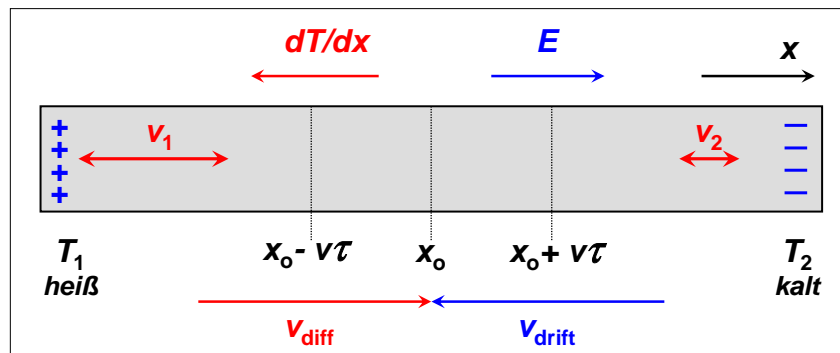


Abbildung 7.15: Zur Entstehung der Thermokraft.

Wir können dieses Ergebnis auf drei Dimensionen erweitern, indem wir v durch $\frac{1}{3}v^2$ ersetzen¹⁴ und erhalten

$$\mathbf{v}_{\text{diff}} = -\frac{\tau}{6} \frac{d\overline{v^2}}{dT} \nabla T . \quad (7.3.27)$$

Durch den Diffusionsstrom baut sich ein elektrisches Feld auf, das einen Driftstrom

$$\mathbf{v}_{\text{drift}} = -\frac{e\tau}{m} \mathbf{E} = \mu \mathbf{E} \quad (7.3.28)$$

zur Folge hat. Im stationären Zustand müssen sich der Diffusions- und Driftstrom gerade kompensieren, woraus sich

$$\frac{1}{3} \frac{d}{dT} \left(\frac{m\overline{v^2}}{2} \right) \nabla T + e \mathbf{E} = 0 \quad (7.3.29)$$

ergibt. Wir benutzen jetzt noch, dass $\frac{d}{dT} \left(\frac{m\overline{v^2}}{2} \right) = c_V/n$, also gleich der spezifischen Wärme pro Teilchen entspricht, und erhalten

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{3ne} c_V \nabla T . \quad (7.3.30)$$

Mit der Definition (7.3.24) der Thermokraft ergibt sich

$$S = -\frac{1}{3ne} c_V = -\frac{\pi^2}{6} \frac{k_B}{e} \frac{k_B T}{E_F} . \quad (7.3.31)$$

Hierbei haben wir den Ausdruck (7.2.7) für die spezifische Wärme des freien Elektronengases benutzt. Wir erhalten für die Thermokraft $S \simeq -142 \mu\text{V}/\text{K} \cdot \frac{T}{T_F}$. Mit $\frac{T}{T_F} \simeq 10^{-2}$ erhalten wir also Werte im Bereich von $-1 \mu\text{V}/\text{K}$. Dieser Wert wird in einfachen Metallen in der Tat beobachtet. Allerdings wird die beobachtete Temperaturabhängigkeit und auch das Vorzeichen der Thermokraft im Modell des freien Elektronengases häufig nicht richtig wiedergegeben. Experimentell findet man häufig eine positive Thermokraft. Eine Erklärung dieser Tatsache erfordert die Einbeziehung des Gitterpotenzials in die Transporttheorie (siehe Kapitel 8).

¹⁴Es gilt $v_x^2 + v_y^2 + v_z^2 = v^2$ und außerdem $v_x^2 = v_y^2 = v_z^2$ für ein isotropes Medium. Deshalb können wir v_x^2 durch $\frac{1}{3}v^2$ ersetzen.

Anmerkung zum Drude-Modell: Das klassische Drude-Modell liefert einen viel zu hohen Wert für die Thermokraft. Dies resultiert daher, dass man in (7.3.31) den um etwa den Faktor $T/T_F \sim 100$ zu großen klassischen Wert $c_V = 3k_B$ für die spezifische Wärme pro Teilchen einsetzt. Im Rahmen des klassischen Modells tragen alle Elektronen zur Thermokraft bei. In Wirklichkeit ist es aber aufgrund des Pauli-Prinzips nur ein kleiner Anteil T/T_F .

7.3.4 Bewegung im Magnetfeld

In Abschnitt 7.3.1 haben wir die Bewegung von Elektronen unter der Wirkung eines elektrischen Feldes diskutiert. Wir wollen diesen Fall nun erweitern, indem wir auch Magnetfelder berücksichtigen. Die auf die Elektronen wirkende Kraft ist dann durch

$$\mathbf{F} = -e[\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}] \quad (7.3.32)$$

gegeben. Zusätzlich zur Kraft $\mathbf{F}_E = -e\mathbf{E}$ durch das elektrische Feld müssen wir die **Lorentz-Kraft** $\mathbf{F}_L = -e\mathbf{v} \times \mathbf{B}$ berücksichtigen. Für die zeitliche Änderung von $\langle \mathbf{k} \rangle$ aufgrund der wirkenden Kräfte und von Streuprozessen erhalten wir dann (vergleiche (7.3.7))

$$\frac{d\langle \mathbf{k} \rangle}{dt} = \frac{\mathbf{F}}{\hbar} - \frac{\delta \mathbf{k}}{\tau} = -\frac{e[\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}]}{\hbar} - \frac{\delta \mathbf{k}}{\tau} \quad (7.3.33)$$

Im stationären Zustand muss diese Änderung verschwinden. Mit der mittleren Driftgeschwindigkeit $\delta \mathbf{v} = \frac{\hbar \delta \mathbf{k}}{m}$ erhalten wir also

$$\delta \mathbf{v} = -\frac{e\tau}{m} [\mathbf{E} + \delta \mathbf{v} \times \mathbf{B}] \quad (7.3.34)$$

Hierbei erscheint in der Lorentz-Kraft nur die mittlere Zusatzgeschwindigkeit $\delta \mathbf{v}$. Für $\mathbf{E} = 0$ können wir im Kristall zu jedem Elektron mit Geschwindigkeit \mathbf{v} auch ein Elektron mit Geschwindigkeit $-\mathbf{v}$ finden, so dass die mittlere Lorentz-Kraft verschwindet.

Wir nehmen im Folgenden an, dass das Magnetfeld parallel zur z -Achse ausgerichtet ist. Wir erhalten dann aus Gleichung (7.3.34) für die kartesischen Komponenten von $\delta \mathbf{v}$:

$$\delta v_x = -\omega_c \tau \left(\frac{E_x}{B} + \delta v_y \right) \quad (7.3.35)$$

$$\delta v_y = -\omega_c \tau \left(\frac{E_y}{B} - \delta v_x \right) \quad (7.3.36)$$

$$\delta v_z = -\omega_c \tau \left(\frac{E_z}{B} \right) \quad (7.3.37)$$

Hierbei haben wir die **Zyklotron-Frequenz**

$$\omega_c \equiv \frac{eB}{m} = 1.76 \times 10^{11} \text{s}^{-1} \cdot B[\text{T}] \quad (7.3.38)$$

verwendet.¹⁵ Lösen wir das Gleichungssystem (7.3.37) nach δv_x , δv_y und δv_z auf und führen die Stromdichte $\mathbf{J} = -ne\delta\mathbf{v}$ ein, so erhalten wir

$$\begin{pmatrix} J_x \\ J_y \\ J_z \end{pmatrix} = -\frac{\sigma_0}{1 + \omega_c^2 \tau^2} \begin{pmatrix} 1 & -\omega_c \tau & 0 \\ +\omega_c \tau & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 + \omega_c^2 \tau^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{pmatrix}. \quad (7.3.39)$$

Hierbei ist

$$\sigma_0 = \frac{ne^2 \tau}{m}. \quad (7.3.40)$$

Hall-Effekt

Wir betrachten nun die in Abb. 7.16 gezeigte Probenform. Das von außen angelegte elektrische Feld soll in x -Richtung zeigen, das Magnetfeld in z -Richtung. Ein Ladungsfluss soll nur in x -Richtung möglich sein. Aus der Bedingung $J_y = 0$ erhalten wir dann aus (7.3.39)

$$\omega_c \tau E_x + E_y = 0 \quad (7.3.41)$$

oder

$$E_y = -\omega_c \tau E_x = -\frac{eB\tau}{m} E_x = -\mu B E_x. \quad (7.3.42)$$

Wir sehen also, dass sich in der Probe ein elektrisches Querfeld in y -Richtung aufbaut. Diese Erscheinung bezeichnen wir als **Hall-Effekt**.¹⁶ Das transversale elektrische Feld nennen wir **Hall-Feld**. Das Hall-Feld kommt dadurch zustande, dass die Elektronen aufgrund der Lorentz-Kraft eine Ablenkung in y -Richtung erfahren und sich dadurch auf der einen Stirnfläche der Probe ansammeln und von der gegenüberliegenden abwandern. Dieser Prozess hält solange an, bis das entstandene elektrische Feld die Ablenkung der Elektronen im Magnetfeld gerade kompensiert.

Wir können in (7.3.42) mit Hilfe von (7.3.39) das elektrische Feld E_x auch durch J_x ausdrücken und erhalten:

$$E_y = -\frac{eB\tau}{m} E_x = -\mu B E_x = -\frac{eB\tau}{m} \frac{J_x}{\sigma_0} = R_H B J_x. \quad (7.3.43)$$

¹⁵Für $\tau \rightarrow \infty$ erhalten wir

$$\begin{aligned} 0 &= \omega_c \delta v_y + \delta \dot{v}_x \\ 0 &= \omega_c \delta v_x - \delta \dot{v}_y \\ 0 &= \delta \dot{v}_z. \end{aligned}$$

Die Lösung dieses Gleichungssystems ist eine Kreisbewegung in der xy -Ebene mit der Kreisfrequenz ω_c . Den Fall $\omega_c \tau \gg 1$ werden wir aber erst später diskutieren. In diesem Fall sind die ebenen Elektronenwellen keine guten Eigenzustände mehr. Wir müssen den Effekt des Magnetfeldes gleich von Anfang an berücksichtigen und neue Eigenzustände berechnen. Für Metalle ist $\ell \simeq 100 \text{ nm}$ bzw. $\tau = \ell/v_F \simeq 10^{-13} \text{ s}$. Mit $\omega_c \simeq 10^{11} \text{ s}^{-1}$ bei $B = 1 \text{ T}$ ist für Metalle üblicherweise $\omega_c \tau \ll 1$. Dies ändert sich nur bei sehr hohen Magnetfeldern und sehr reinen Proben bei sehr tiefen Temperaturen.

¹⁶**Edwin Herbert Hall**, geboren am 07. November 1855 in Great Falls, Maine; gestorben am 20. November 1938 in Cambridge, Massachusetts. 1879 entdeckte Hall im Alter von 24 Jahren den später nach ihm benannten Hall-Effekt. Diese Entdeckung geschah im Zusammenhang mit seiner Doktorarbeit unter Henry Augustus Rowland (1848-1901). Von 1881 bis 1921 forschte er an der Harvard Universität auf dem Gebiet der Thermoelektrizität.

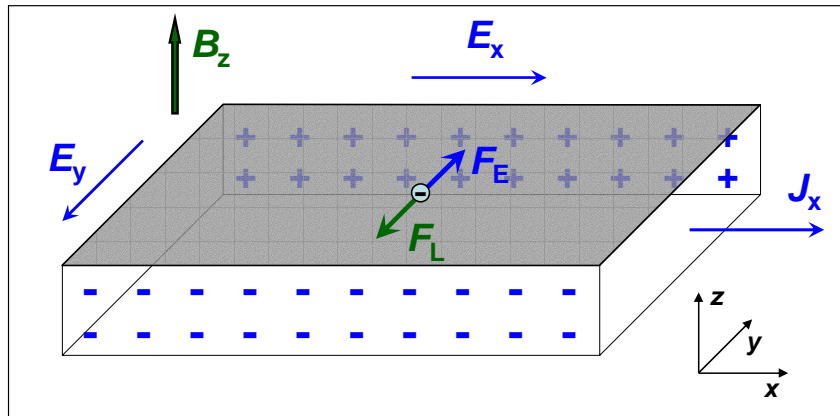


Abbildung 7.16: Zur Veranschaulichung des Hall-Effekts. Die Elektronen bewegen sich entgegen der technischen Stromrichtung. Im stationären Zustand kompensiert die Kraft $F_E = -eE_y$ durch das Hall-Feld die Lorentz-Kraft $F_L = -e\delta\mathbf{v} \times \mathbf{B}$.

Die Größe

$$R_H = -\frac{1}{ne} \quad (7.3.44)$$

bezeichnen wir als *Hall-Konstante* und

$$\rho_{xy} = \frac{E_y}{J_x} = R_H B \quad (7.3.45)$$

als *spezifischen Hall-Widerstand*. Den Winkel

$$\tan \theta_H = \frac{E_y}{E_x} = \frac{eB\tau}{m} = \sigma_0 R_H \quad (7.3.46)$$

nennen wir *Hall-Winkel*.

Durch Messung der Hall-Konstante erhalten wir also das Vorzeichen und die Dichte der Ladungsträger im untersuchten Festkörper. Um das Vorzeichen des Hall-Effekts im Detail zu verstehen, müssen wir aber, ähnlich wie bei der Thermokraft, die Bandstruktur des Festkörpers berücksichtigen (siehe hierzu Kapitel 8 und 9).

Das Ergebnis, dass der Hall-Koeffizient proportional zu $1/ne$ ist, kann mit kinetischen Vorstellungen verstanden werden, wenn wir annehmen, dass die Ladungsträger mit der Geschwindigkeit $\delta\mathbf{v}$ driften und dabei die Lorentz-Kraft $e\delta\mathbf{v} \times \mathbf{B}$ senkrecht zum Magnetfeld erfahren. Das transversale elektrische Feld $\mathbf{E}_H = \mathbf{B} \times \delta\mathbf{v} = \mathbf{B} \times \frac{1}{ne}\mathbf{J}_q$ wird gerade zur Kompensation dieser Ablenkkraft benötigt. Die Proportionalität zu $1/n$ ergibt sich dabei gerade deshalb, da sich bei einer gegebenen Stromstärke die Ladungsträger umso schneller bewegen müssen, je kleiner die Ladungsdichte ist und daher umso stärker im Magnetfeld abgelenkt werden.

Messung des Hall-Effekts:

Für die Messung des Hall-Effekts verwendet man üblicherweise die in Abb. 7.17 gezeigte Probengeometrie. Man erhält mit obigen Gleichungen sofort, dass die gemessene Hall-Spannung durch

$$U_H = R_H B J b = \rho_H J b = \frac{\rho_H I}{d} \quad (7.3.47)$$

gegeben ist. Das heißt, U_H steigt mit zunehmender Stromdichte J und zunehmendem Magnetfeld B sowie mit zunehmender Probenbreite b an. Da man im Experiment B und J (z.B. wegen Heizeffekten) nicht beliebig erhöhen kann, kann man die Probenbreite erhöhen, um eine genügend große Hall-Spannung zu erzielen. Dabei muss allerdings beachtet werden, dass man nicht durch eine gegenseitige Verschiebung der Spannungsabgriffe für U_H einen longitudinalen Spannungsanteil mitmisst.

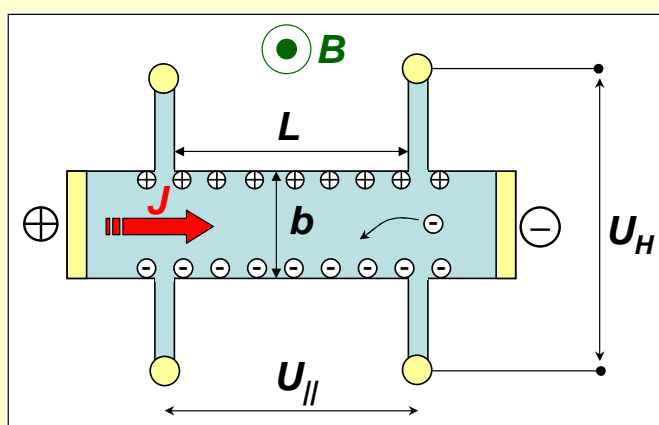


Abbildung 7.17: Typische Probengeometrie zur Messung des Hall-Effekts: Hall-Barren mit Länge L , Breite b und Dicke d , das Magnetfeld steht senkrecht auf der Probenebene.

Magnetwiderstand

Als Magnetwiderstand bezeichnen wir den magnetfeldabhängigen spezifischen Widerstand $\rho = \rho(B)$ eines Festkörpers. Je nach relativer Orientierung von Strom- und Magnetfeldrichtung unterscheiden wir zwischen:

$$\begin{aligned} \text{longitudinaler Magnetwiderstand} \quad \rho_{\parallel} \quad & \mathbf{B} \parallel \mathbf{J} \\ \text{transversaler Magnetwiderstand} \quad \rho_{\perp} \quad & \mathbf{B} \perp \mathbf{J} . \end{aligned} \quad (7.3.48)$$

Transversaler Magnetwiderstand: Wir betrachten wieder die in Abb. 7.16 gezeigte Geometrie. Der von außen aufgeprägte Strom soll in x -Richtung fließen und das Magnetfeld soll in z -Richtung angelegt sein. Mit der Bedingung $J_y = 0$ folgt aus (7.3.39)

$$\omega_c \tau E_x + E_y = 0 . \quad (7.3.49)$$

Setzen wir den daraus folgenden Ausdruck für E_y in (7.3.39) ein, so erhalten wir

$$\begin{aligned} J_x &= \frac{\sigma_0}{1 + \omega_c^2 \tau^2} E_x - \omega_c \tau E_y = \frac{\sigma_0}{1 + \omega_c^2 \tau^2} E_x + \omega_c^2 \tau^2 E_x \\ &= \frac{\sigma_0}{1 + \omega_c^2 \tau^2} (1 + \omega_c^2 \tau^2) E_x = \sigma_0 E_x . \end{aligned} \quad (7.3.50)$$

Wir sehen also, dass $\rho(B) = 1/\sigma_0 = \text{const}$ ist. Der transversale Magnetwiderstand in der gezeigten Konfiguration verschwindet also. Die Ursache dafür ist, dass die aus dem Hall-Feld E_y resultierende Kraft $-eE_y$ die Lorentz-Kraft $-e\mathbf{v} \times \mathbf{B} = -ev_x B_z$ gerade kompensiert. Die Ladungsträger können sich somit in x -Richtung bewegen, ohne dass sie die Lorentz-Kraft aufgrund des anliegenden Magnetfeldes spüren. In Experimenten beobachtet man allerdings immer einen endlichen Magnetwiderstand. Dies zeigt, dass das Bild der freien Elektronen zu einfach ist und wir für die Erklärung des transversalen Magnetwiderstands unser Modell erweitern müssen. Dies können wir z.B. im Rahmen des Modells freier Elektronen durch ein so genanntes *Zweibandmodell* tun, das wir später in Abschnitt 9.6.2 vorstellen werden. Wir werden in Kapitel 9 aber auch sehen, dass wir bei Berücksichtigung des periodischen Gitterpotenzials und des damit verbundenen Übergangs von freien Elektronen zu Kristallelektronen eine starke Modifikation der Bewegung von Elektronen in elektrischen und magnetischen Feldern erhalten. Dies werden wir in Kapitel 9 genauer diskutieren.

Longitudinaler Magnetwiderstand: Im Modell der freien Elektronen erwarten man weder für das Einbandmodell noch für das Zweibandmodell (siehe Abschnitt 9.6.2) einen endlichen longitudinalen Magnetwiderstand im Widerspruch zu den experimentellen Befunden. Für das Verständnis des longitudinalen Magnetwiderstands benötigen wir die Kenntnis der $E(\mathbf{k})$ -Abhängigkeiten von Elektronen unter dem Einfluss des periodischen Gitterpotenzials. Wir werden in Kapitel 8 sehen, dass die Flächen konstanter Energie für solche Elektronen eine komplizierte Form annehmen können. Einen longitudinalen Magnetwiderstand erwarten wir nur dann, wenn die Flächen konstanter Energie nicht mehr wie für freie Elektronen kugelsymmetrisch sind. Generell ist die Abhängigkeit des Magnetwiderstands einer einkristallinen Probe eine komplizierte Funktion der Richtung von Strom und Magnetfeld relativ zu den Kristallachsen. Diesen komplexen Zusammenhang wollen wir hier nicht diskutieren.

Vertiefungsthema: Magnetowiderstandseffekte

Als Magnetowiderstandseffekt (MR: Magneto Resistance) bezeichnet man die relative Änderung des elektrischen Widerstands als Funktion des angelegten Magnetfeldes:

$$\text{MR} = \frac{\rho(B) - \rho(0)}{\rho(0)} = \frac{\Delta\rho}{\rho} \quad (7.3.51)$$

Alle nicht-magnetischen Metalle zeigen einen positiven Magnetwiderstandseffekt (der Widerstand nimmt mit wachsendem Feld zu). Dieser ist eine Folge der Lorentz-Kraft, die ein angelegtes Magnetfeld auf die sich bewegenden Ladungsträger ausübt. Die Elektronen bewegen sich deshalb zwischen zwei Stößen (z.B. mit Verunreinigungen oder Phononen) auf gekrümmten Bahnen. Anschaulich kann man sich deshalb den positiven Magnetwiderstand durch eine Verkleinerung der effektiven freien Weglänge ℓ zwischen zwei Stoßereignissen erklären (eine genauere Diskussion folgt später). Der positive Magnetwiderstand folgt der so genannten *Kohler-Regel*^{17,18,19}

$$\frac{\Delta\rho}{\rho_0} = \frac{\rho(B) - \rho(0)}{\rho(0)} = F\left(\frac{B}{\rho(0)}\right) = F(\omega_c \tau) \quad (7.3.52)$$

¹⁷Kohler, *Annalen der Physik* **32**, 211 (1938).

¹⁸J. M. Ziman, *Electrons and Phonons*, Clarendon Press (1963), p. 491.

¹⁹Es gilt $B/\rho(0) = ne \frac{eB}{m} \tau = ne \omega_c \tau$. Da der Zyklotron-Radius durch $R_c = \omega_c / v_F$ und die mittlere freie Weglänge durch $\ell = v_F \tau$ gegeben ist, können wir auch $B/\rho(0) = ne \frac{\ell}{R_c}$ schreiben.

Hierbei ist F eine Funktion, die von der Art des jeweiligen Metalls abhängt. Da der Magnetwiderstand nicht vom Vorzeichen von \mathbf{B} abhängen darf, kann die Funktion F keine lineare Funktion in B sein. Experimentell beobachtet man in kleinen Feldern meist eine quadratische Abhängigkeit. Eine Plausibilitätsbetrachtung dafür ist nachfolgendem Kasten gegeben, eine tiefere Diskussion folgt später in Kapitel 9.

Plausibilitätsklärung für den Magnetwiderstand:

Wir gehen davon aus, dass die Ladungsträger nach der mittleren Zeit τ elastisch gestreut werden. Die Leitfähigkeit ist proportional zur mittleren freien Weglänge $\ell = v_F \tau$. Die Ladungsträger bewegen sich zwischen den Streuprozessen auf *Landau-Bahnen* mit Radius $R_c = v_F m / eB$, wobei die Umlauffrequenz durch die *Zyklotron-Frequenz* $\omega_c = eB/m$ gegeben ist (siehe Abb. 7.18) Mit den Bezeichnungen $\ell_0 = \tau v_F$, $\ell_0/R_c = \varphi$ und $R_c = v_F/\omega_c$ ergibt sich aus Abb. 7.18c

$$\frac{\ell/2}{R_c} = \sin\left(\frac{\varphi}{2}\right) \simeq \frac{\varphi}{2} - \frac{1}{6} \left(\frac{\varphi}{2}\right)^3 \quad (7.3.53)$$

und damit

$$\ell = \ell_0 \left(1 - \frac{1}{24} \tau^2 \omega_c^2\right) . \quad (7.3.54)$$

Der spezifische Widerstand ρ ist reziprok zur effektiven mittleren freien Weglänge ℓ und damit ergibt sich

$$\frac{\Delta\rho}{\rho_0} = \frac{\ell_0^{-1} \left(1 - \frac{1}{24} \tau^2 \omega_c^2\right)^{-1} - \ell_0^{-1}}{\ell_0^{-1}} . \quad (7.3.55)$$

Mit $\sigma = ne^2\tau/m$ und $\omega_c = eB/m$ folgt dann $\frac{\Delta\rho}{\rho_0} = \frac{1}{24n^2e} \left(\frac{B}{\rho_0}\right)^2$, was der Kohler-Regel entspricht.

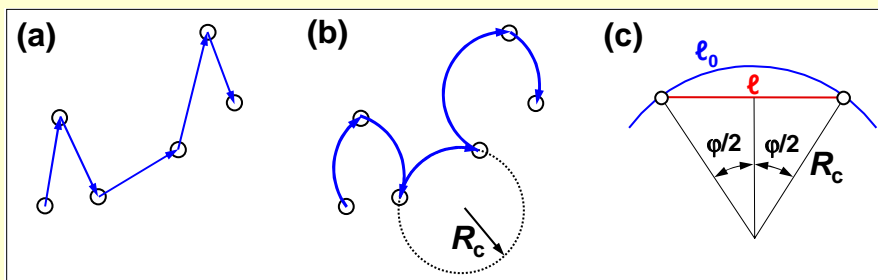


Abbildung 7.18: Driftbewegung von Elektronen ohne (a) und mit (b) Magnetfeld. Vollständige Umläufe auf Landau-Bahnen sind nur bei sehr niedrigen Temperaturen, sehr reinen Proben und hohen Magnetfeldern zu erwarten.

Der positive Magnetwiderstand tritt auch in magnetischen Metallen auf, auch wenn er dort teilweise von wesentlich größeren negativen Magnetowiderstandseffekten (der Widerstand nimmt mit zunehmendem Feld ab) überlagert wird. Gleichung (7.3.52) zeigt, dass der positive Magnetwiderstand sehr groß werden kann, wenn ρ_0 sehr klein bzw. die Streuzeit τ sehr groß ist. Dies ist in sehr reinen Metallen bei sehr tiefen Temperaturen der Fall.²⁰ So nimmt z.B. in reinem Cu oder Ag der Widerstand in angelegten Feldern von etwa 10 T bei niedrigen Temperaturen um bis zu 5% zu. Bei Raumtemperatur ist der positive Magnetwiderstand aber generell klein und deshalb nicht für Anwendungen nutzbar.

²⁰E. Fawcett, *Advances in Physics* **13**, 139 (1964).

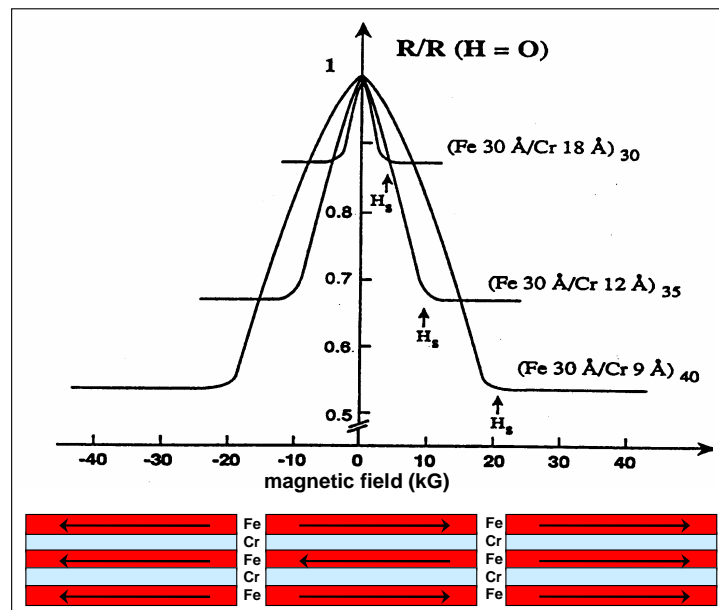


Abbildung 7.19: Magnetwiderstand von Fe/Cr-Schichtstrukturen bei 4.2 K. Es wird ein maximaler Magnetwiderstand bei einer Cr-Schichtdicke von 0.9 nm beobachtet. Für diese Schichtdicke liegt im feldfreien Fall eine antiparallele Kopplung der Magnetisierungen vor (nach M. N. Baibich *et al.*, Phys. Rev. Lett. 61, 2472 (1988)).

Eine Vielzahl weiterer, meist negativer magnetoresistiver Effekte tritt in ferromagnetischen Metallen und Schichtstrukturen aus solchen Metallen auf:²¹

- AMR (Anisotropic MagnetoResistance)
- GMR (Giant MagnetoResistance)
- CMR (Colossal MagnetoResistance)
- TMR (Tunneling MagnetoResistance)
- BMR (Ballistic MagnetoResistance)
- EMR (Extraordinary MagnetoResistance)
- GMI (Giant MagnetoImpedance)

Lange bekannt ist der *“anisotrope magnetoresistive Effekt”* (AMR), der bereits 1857 durch **Thomson** entdeckt wurde und in ferromagnetischen Materialien auftritt. Deren spezifischer Widerstand ist parallel zur Magnetisierung einige Prozent größer als senkrecht dazu. Der AMR ist allerdings erst über 100 Jahre nach seiner Entdeckung in die erste technische Anwendungen eingeflossen. Dabei handelte es sich um die Leseeinheit in Bubblespeichern Ende der 1960er Jahre. Um 1980 wurde mit der Entwicklung der ersten AMR-Sensoren begonnen. In dünnen Schichten aus weichen ferromagnetischen Materialien ist die Magnetisierung leicht drehbar, so dass mit Hilfe des AMR Magnetfeldsensoren realisiert werden können.

Eine rasante Entwicklung der Untersuchung und auch der technischen Nutzung magnetoresistiver Effekte setzte Ende der 1980er Jahre ein, als **Peter Grünberg** und **Albert Fert** fast zeitgleich entdeckten, dass der elektrische Strom in Schichtsystemen, die aus ferromagnetischen

²¹siehe z.B. *Spinelektronik*, R. Gross und A. Marx, Vorlesungsskript, Technische Universität München (2004).

und nicht-magnetischen, metallischen Schichten bestehen, stark von der relativen Orientierung der Magnetisierung in den ferromagnetischen Schichten abhängt.^{22,23,24} Es wurde festgestellt, dass der elektrische Widerstand der Vielschichtsysteme groß bzw. klein ist, wenn in benachbarten ferromagnetischen Schichten die Magnetisierungsrichtungen antiparallel bzw. parallel ausgerichtet sind (siehe Abb. 7.19). Der damit verbundene, sehr große magnetoresistive Effekt (typischerweise einige 10 bis 100%) wurde **Giant MagnetoResistance** (GMR) Effekt genannt. Dieser Effekt wurde bereits 10 Jahre nach seiner Entdeckung in Leseköpfen von Computer-Festplatten verwendet und hat zu einem großen wirtschaftlichen Erfolg geführt.²⁵ Weitere magnetoresistive Effekte wie der **Colossal MagnetoResistance** (CMR) Effekt^{26,27,28} oder der **Tunneling MagnetoResistance** (TMR) Effekt^{29,30} werden heute intensiv erforscht. Der TMR kommt bereits heute bei der Realisierung von so genannten Magnetic Random Access Memories (MRAM) zum Einsatz. Hierbei handelt es sich um nichtflüchtige Speicherelemente mit Zugriffszeiten im ns-Bereich.^{31,32}

²²P. Grünberg, R. Schreiber, Y. Pang, M.B. Brodsky, H. Sower, Phys. Rev. Lett. **57**, 2442 (1986).

²³G. Binasch, P. Grünberg, F. Saurenbach, W. Zinn, Phys. Rev. **B 39**, 4828 (1989).

²⁴M.N. Baibich, J.M. Broto, A. Fert, Van Dau Nguyen, F. Petroff, P. Etienne, G. Creuset, A. Friedrich, J. Chazelas, Phys. Rev. Lett. **61**, 2472 (1988).

²⁵P. Grünberg, *Magnetfeldsensor mit ferromagnetischer dünner Schicht*, Patent-Nr.: P 3820475 (1988).

²⁶R. von Helmholt, J. Wecker, B. Holzapfel, L. Schultz, and K. Samwer, Phys. Rev. Lett. **71**, 2331 (1993).

²⁷J.M.D. Coey, M. Viret, S. von Molnar, Adv. Phys. **48**, 167 (1999).

²⁸Y. Tokura (Ed.), *Colossal Magnetoresistive Oxides*, Gordon and Breach Science Publishers, London (1999).

²⁹J. S. Moodera, L. R. Kinder, T. M. Wong, R. Meservey, Phys. Rev. Lett. **74**, 3273 (1995).

³⁰T. Miyazaki et al., J. Magn. Magn. Mat. **151**, 403 (1995).

³¹*Spin Electronics*, M. Ziese and M. J. Thornton eds., Springer Berlin (2001).

³²*Magnetische Schichtsysteme*, 30. Ferienkurs des Instituts für Festkörperforschung, FZ-Jülich GmbH, Schriften des Forschungszentrums Jülich (1999).