



TECHNISCHE UNIVERSITÄT
CHEMNITZ

Physik der kondensierten Materie

Kapitel 7 – Das freie Elektronengas

Ulrich Schwarz
Experimentelle Sensorik
Institut für Physik, TU Chemnitz

Sommersemester 2019

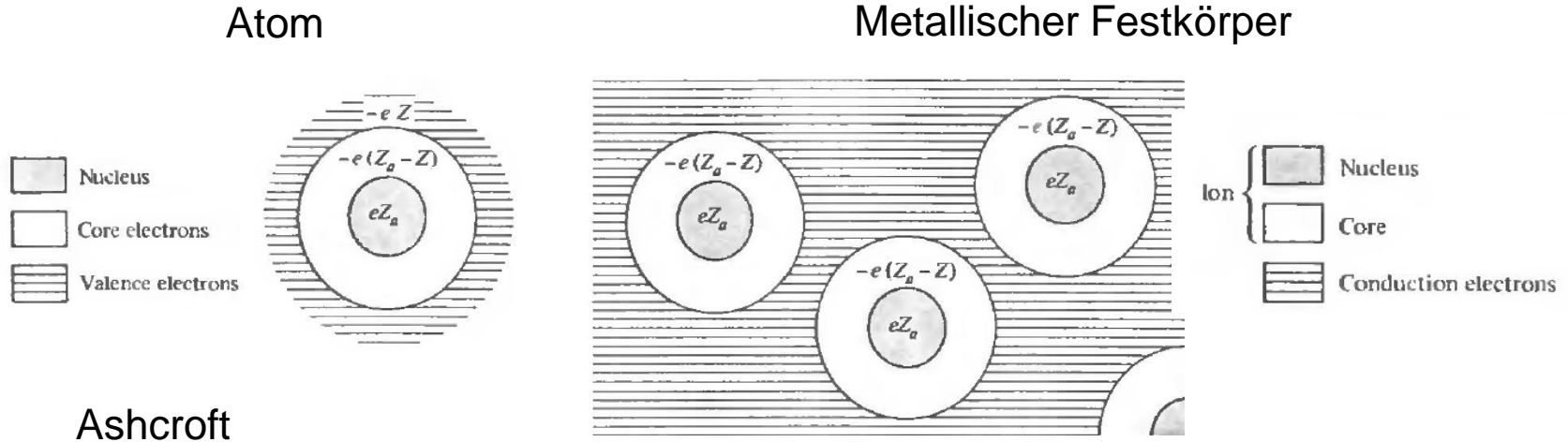
Das freie Elektronengas

Inhalt:

- 7.1 Modell des freien Elektronengases
- 7.2 Übergang zum Quantengas
- 7.3 Fermi-Verteilung und Fermi-Energie
- 7.4 Elektronische spezifische Wärme
- 7.5 Elektrische Leitfähigkeit
- 7.6 Bewegung im Magnetfeld

Siehe Ibach/Lüth (Kap. 6), Gross/Marx (Kap. 7-7.3)
und Demtröder III (Kap. 13.1) **etc.**

7.1 Modell des freien Elektronengases



Delokalisierte Elektronen sind nicht an Atomgitter gebunden (im Gegensatz zu Isolatoren)

Statische Näherung: ruhendes Gitter

Annahmen des Freies Elektronengas

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

7.1 Typische Eigenschaften von Metallen

große Zahl nächster Nachbarn z.B. in

hcp $n_{nn}=12$

fcc $n_{nn}=12$

bcc $n_{nn}=8$

(Nichtmetalle $n_{nn}\sim 4-6$)

Kleine Anzahl von Valenzelektronen, typisch ~ 1
aber interatomare Abstände \gg Ionenradien

z.B. Li: 3 Å vs. 0.5 Å

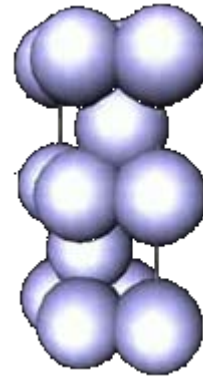
Gitterkonstante: 0.35 nm,

Ionenradius Li^+ : 0.09 nm

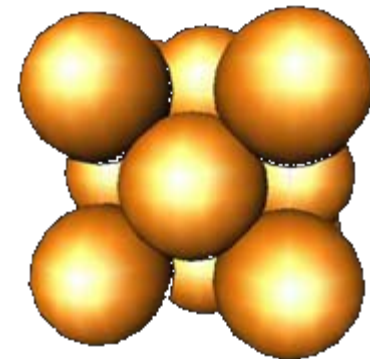
Radius Li: 0.13 nm

Betrachtung der Valenzelektronen + Ionenrümpfe \rightarrow

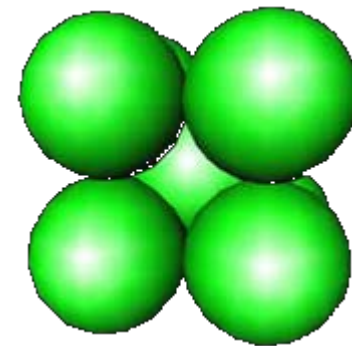
$\sim 10^{23}$ Vielteilchenproblem!!



La - Lu, hcp



Au: fcc



Cr: bcc

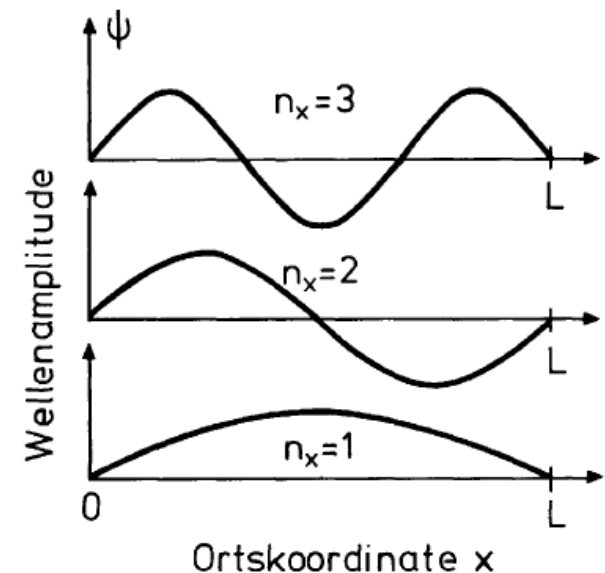
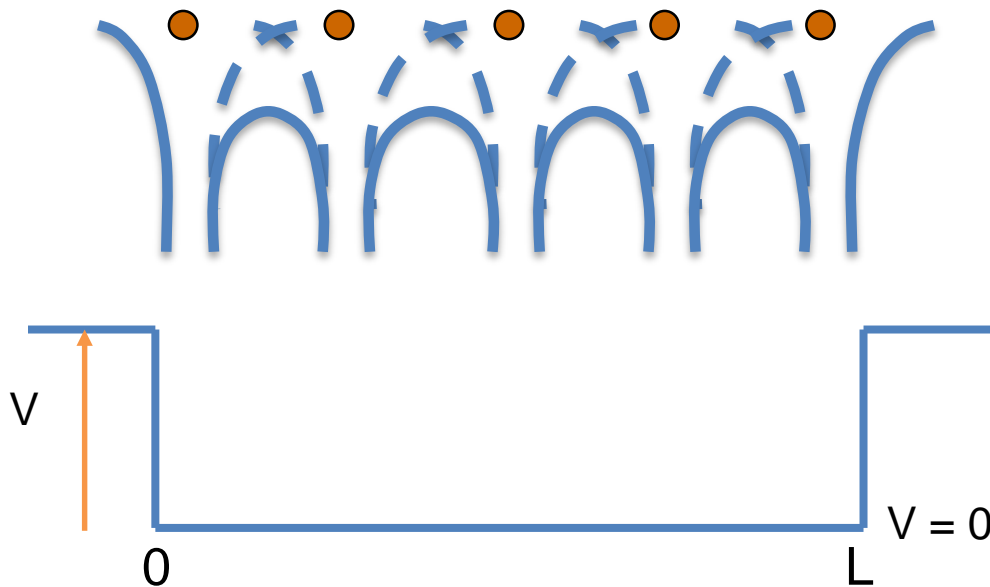
7.2 Übergang zum Quantengas

Metallkristall als Würfel mit der Kantenlänge L , entspricht:

- 3D-Potentialkasten in dem Elektronen eingesperrt sind
- keine Wechselwirkungen zwischen den Elektronen

Freies Elektronengas

- periodisches Gitterpotential wird durch konstantes Potential angenähert
- Schrödinger Gleichung in Ein-Elektronen-Näherung ansetzen



7.2 Zustandsdichte im reziproken k-Raum

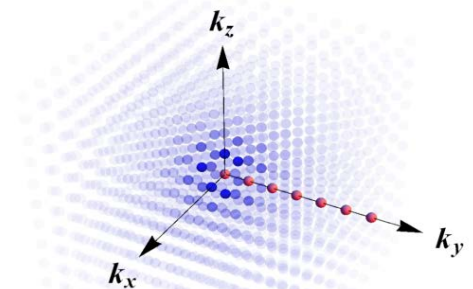
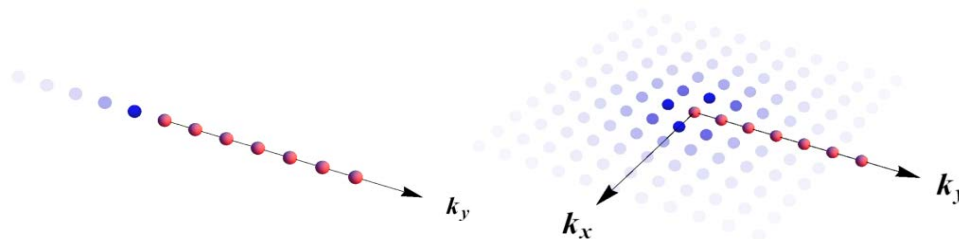
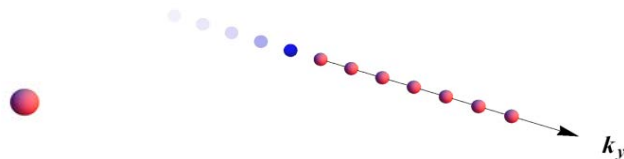
Äquidistante Zustände im k-Raum

0D
0-dimensional
Atom,
Quantenpunkt
 \vec{k} ist keine gute
Quantenzahl

1D
Quantendraht
Impuls
 $\vec{k} = k_x = \frac{2\pi}{L_x} n_x$
Dichte, pro
reziproker Länge
 $Z(k) = \frac{L_x}{2\pi}$

2D
Quantenfilm
Impuls
 $\vec{k} = (k_x, k_y, 0) =$
 $(\frac{2\pi}{L_x} n_x, \frac{2\pi}{L_y} n_y, 0)$
Dichte, pro
reziproker Fläche
 $Z(k) = \frac{L_x L_y}{(2\pi)^2}$
 $Z(k) = \frac{A}{(2\pi)^2}$

3D
Volumen (bulk)
Impuls
 $\vec{k} = (k_x, k_y, k_z) =$
 $(\frac{2\pi}{L_x} n_x, \frac{2\pi}{L_y} n_y, \frac{2\pi}{L_z} n_z)$
Dichte, pro
reziprokem Volumen
 $Z(k) = \frac{L_x L_y L_z}{(2\pi)^3}$
 $Z(k) = \frac{V}{(2\pi)^3}$

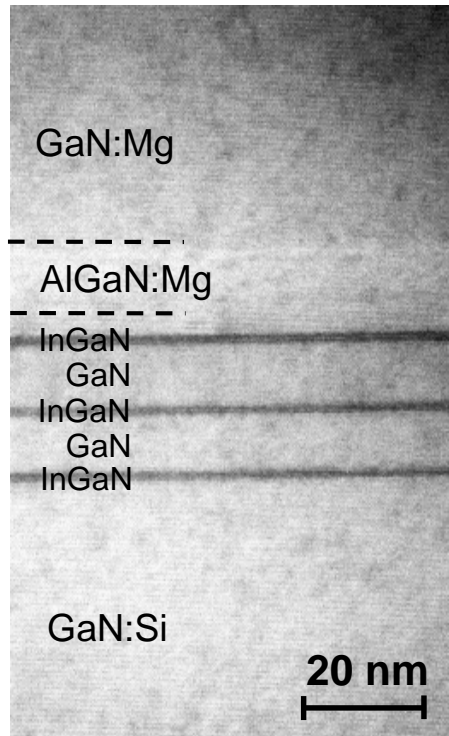


Zustandsdichte jeweils mit 2 multiplizieren für Spin-Freiheitsgrad

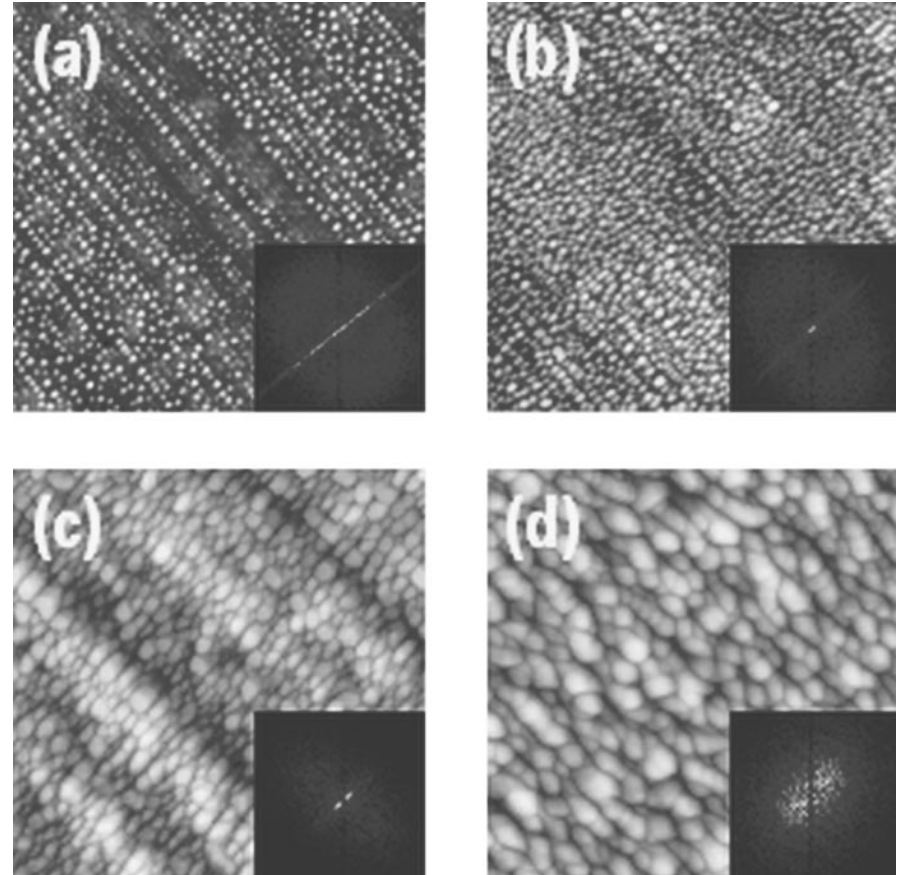
7.2 Zustandsdichte im reziproken k-Raum

Beispiele Quantenfilme und Quantenpunkte

GaN quantum dots in AlN matrix,
grown by MBE (molecular beam epitaxy)



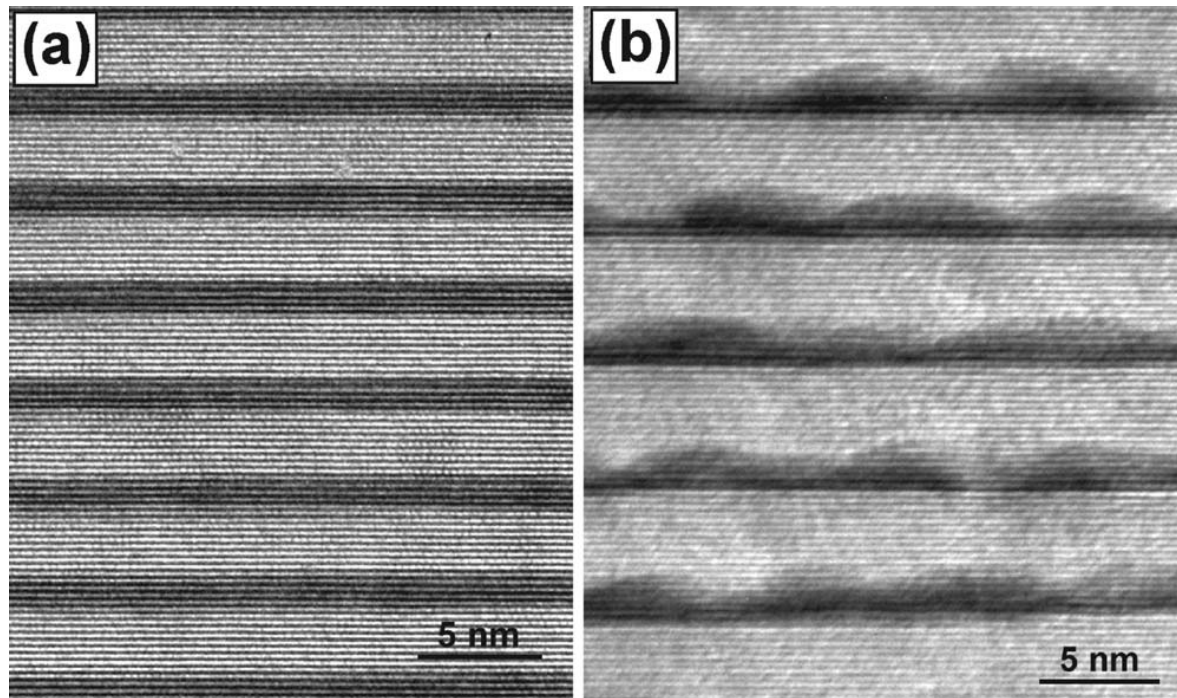
TEM
(Transmissionselektronen-
mikroskopie): K. Engl



AFM and Rheed image

7.2 Zustandsdichte im reziproken k-Raum

Beispiele Quantenfilme und Quantenpunkte



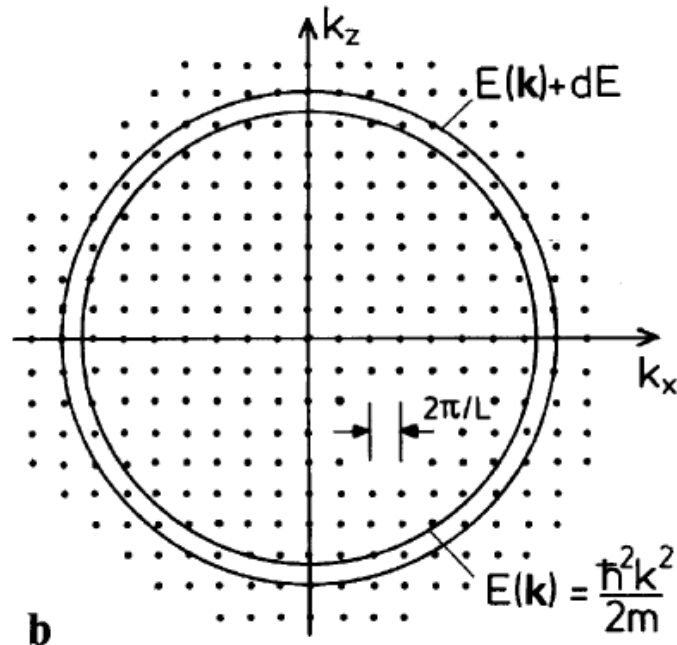
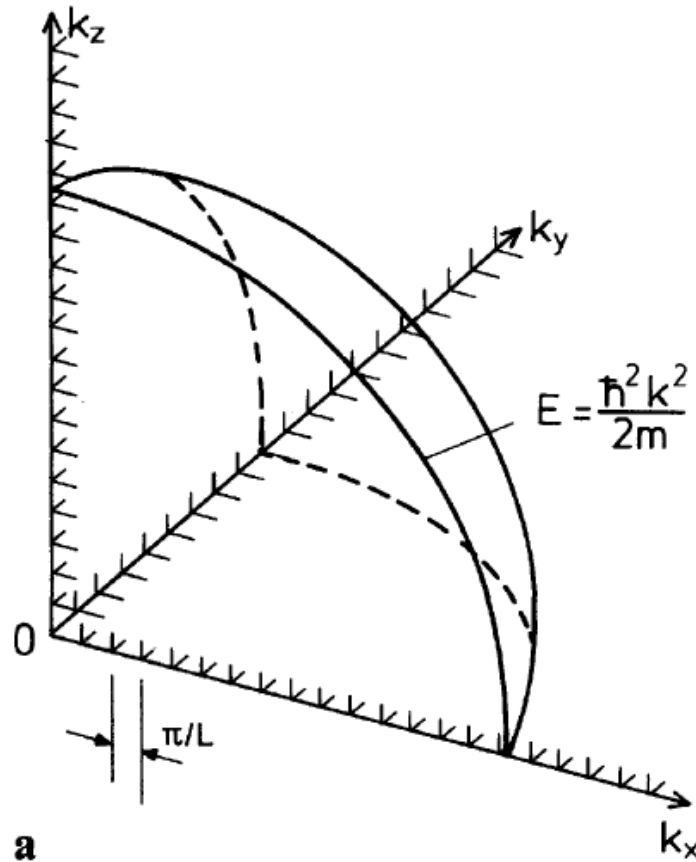
GaN quantum dots
in AlN matrix,
grown by MBE

Transmission electron microscopy
image (cross section)

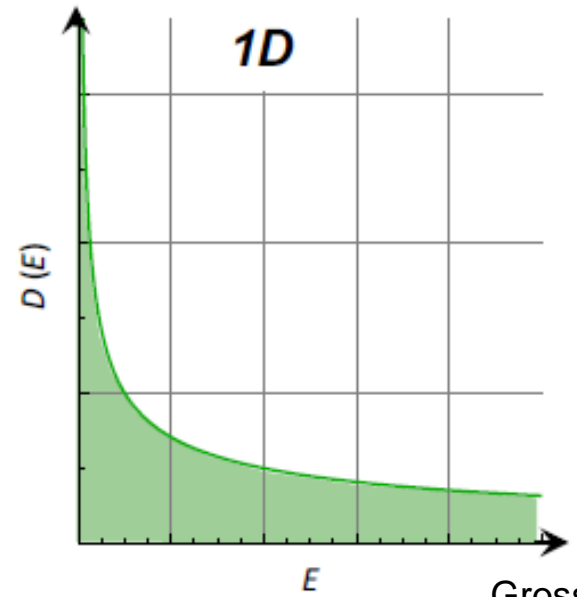
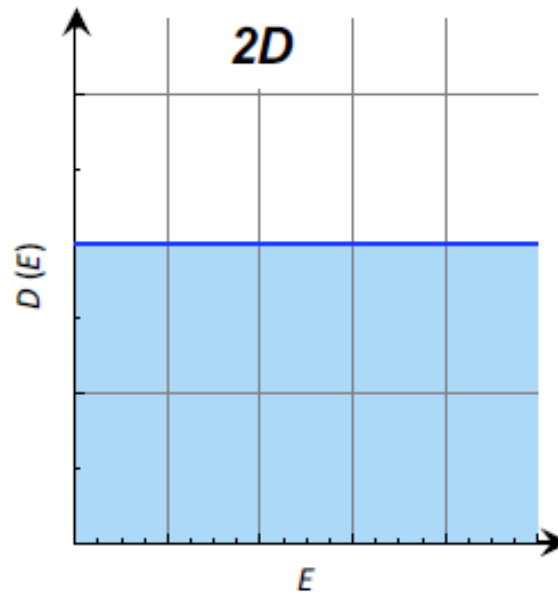
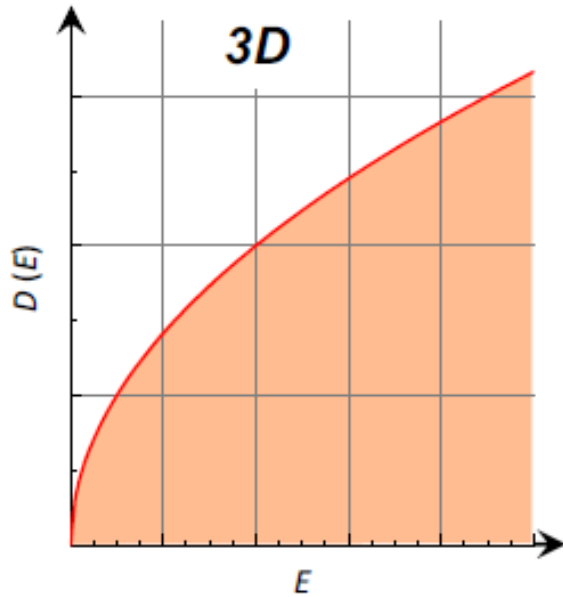
7.2 3D-Potentialkasten

Darstellung der Zustände eines Elektrons im Potentialkasten durch das Punktgitter im ***k*-Raum** der Wellenzahlvektoren.

$$D(\mathbf{k}) = \underbrace{2}_{\uparrow\downarrow} \frac{V}{(2\pi)^3} \quad (\text{Spin!})$$



7.2 Zustandsdichte für ein 1D, 2D, 3D Elektronengas



Gross, Marx

$$D(\mathbf{k}) = 2 \frac{L^3}{(2\pi)^3} = 2 \frac{V}{(2\pi)^3}$$

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

$$D(\mathbf{k}) = 2 \frac{L^2}{(2\pi)^2} = 2 \frac{A}{(2\pi)^2}$$

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

$$D(\mathbf{k}) = 2 \frac{L}{2\pi}$$

$$D(E) = \frac{L}{2\pi} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} E^{-\frac{1}{2}}$$

Vorschau: 8.5 Zustandsdichte

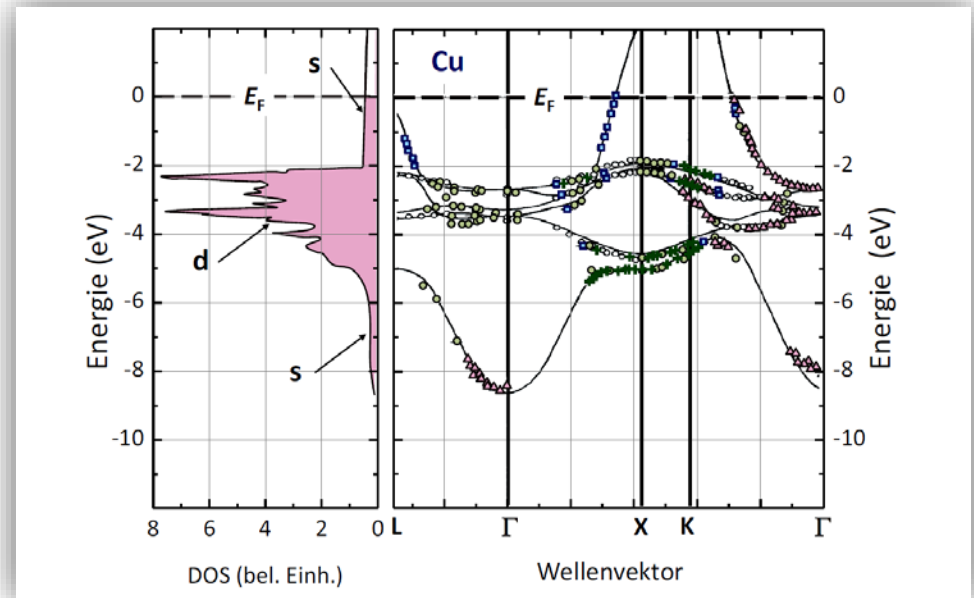
$$dZ = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_E^{E+dE} dk$$

$$dE = |\text{grad}_{\mathbf{k}} E| dk_{\perp}$$

$$d\mathbf{k} = df_E dk_{\perp}$$

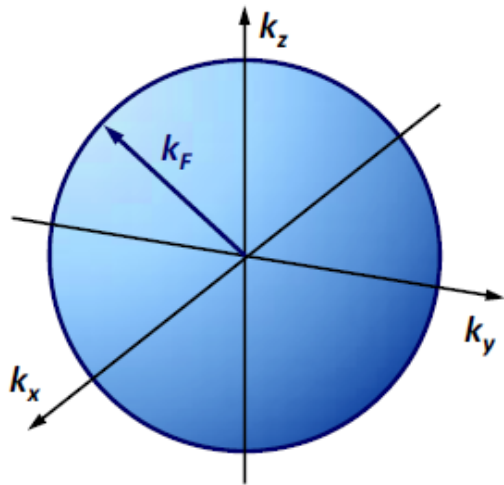
f_E Flächenelement

$$D(E)dE = \frac{1}{(2\pi)^3} \left(\int_{E(\mathbf{k})=\text{const}} \frac{df_E}{|\text{grad}_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k})|} \right) dE$$

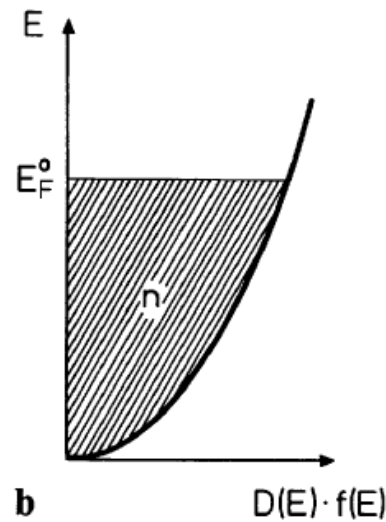
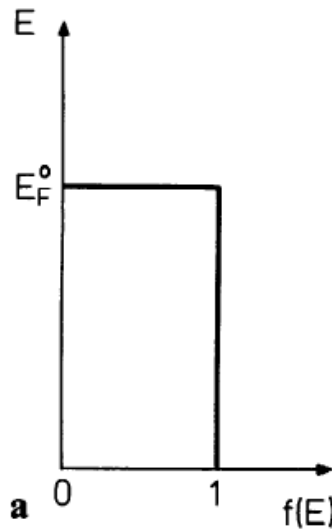
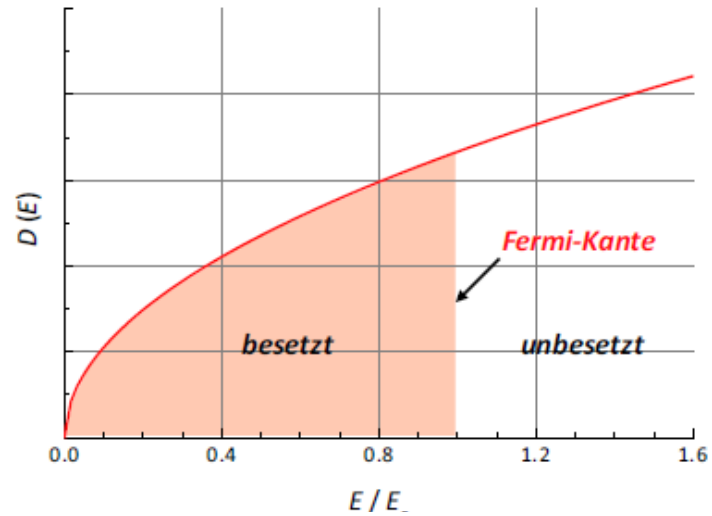


Die Hauptstruktur in der Funktion $D(E)$ wird wieder durch solche Punkte im **k-Raum** geliefert, wo $\text{grad}_{\mathbf{k}} E$ verschwindet, d. h. wo die Energieflächen flach verlaufen. Diese Punkte heißen van Hove-Singularitäten oder kritische Punkte.

7.3 Fermikugel und Fermienergie



Gross, Marx



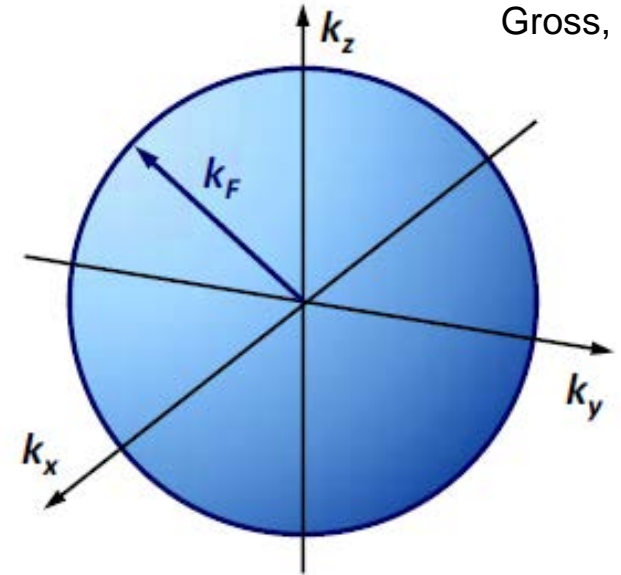
Ibach, Lüth

7.3 Fermi-Energie

Gross, Marx

Freies Elektronengas: Zwei Zustände ($\uparrow\downarrow$)
 pro Zustand im \mathbf{k} -Raum $\rightarrow N$ Zustände

$$N = \underbrace{2 \frac{V}{(2\pi)^3}}_{Z(\mathbf{k})} \underbrace{\left(\frac{4}{3} \pi k_F^3 \right)}_{V_{\text{Fermi-Kugel}}}$$



Fermi-Wellenzahl: Zustände in der Fermi-Kugel mit $|k| \leq k_F$ (bei $T=0\text{K}$)

$$k_F = \left(3\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{\frac{1}{3}} = (3\pi^2 n)^{\frac{1}{3}}$$

Radius der Fermi-Kugel

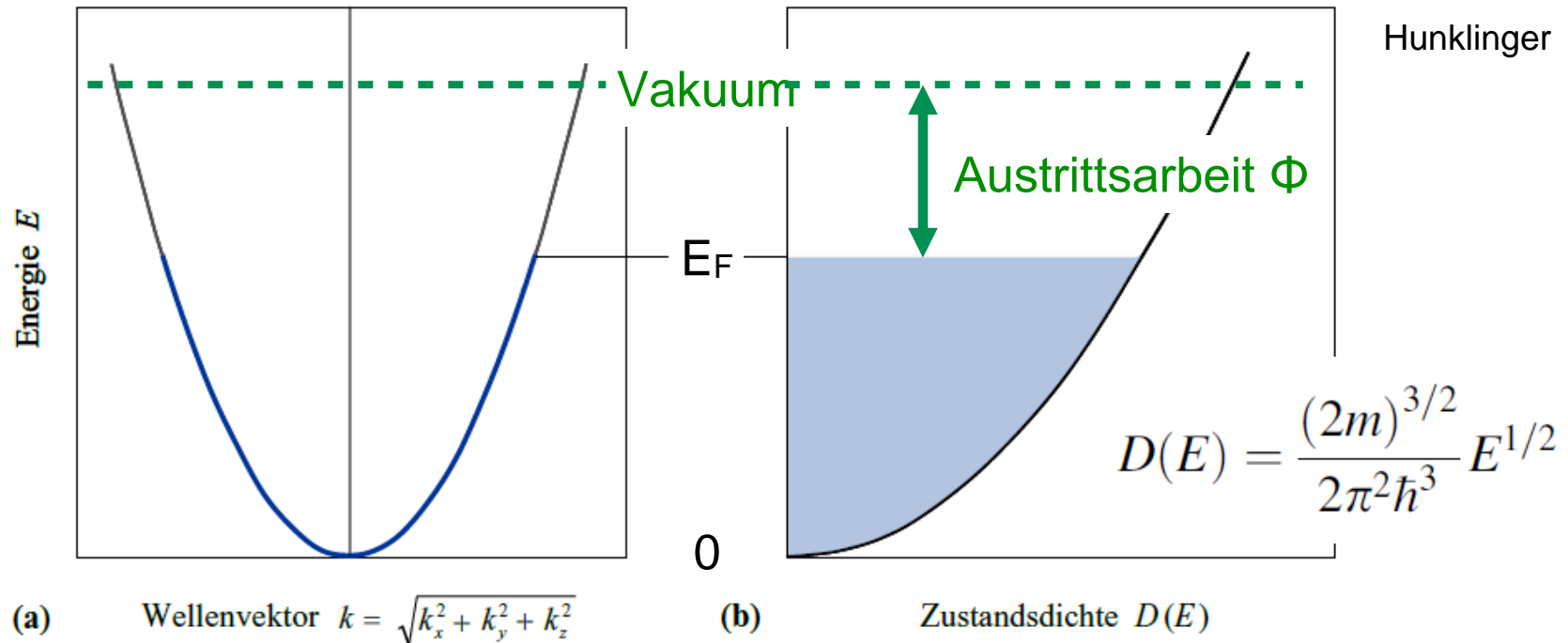
$$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3} \quad \text{Fermi-Energie}$$

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

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

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

7.3 Fermi-Energie



Fermi-Energie: Zustandsdichte aufgefüllt bis E_F (bei $T=0\text{K}$)

Typische Werte für Metalle mit Elektronendichte $n \sim 5 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$:

$$E_F \sim 4 \text{ eV}, \quad k_F \sim 10^8 \text{ cm}^{-1}, \quad \lambda_F \sim 0,1 \text{ nm},$$

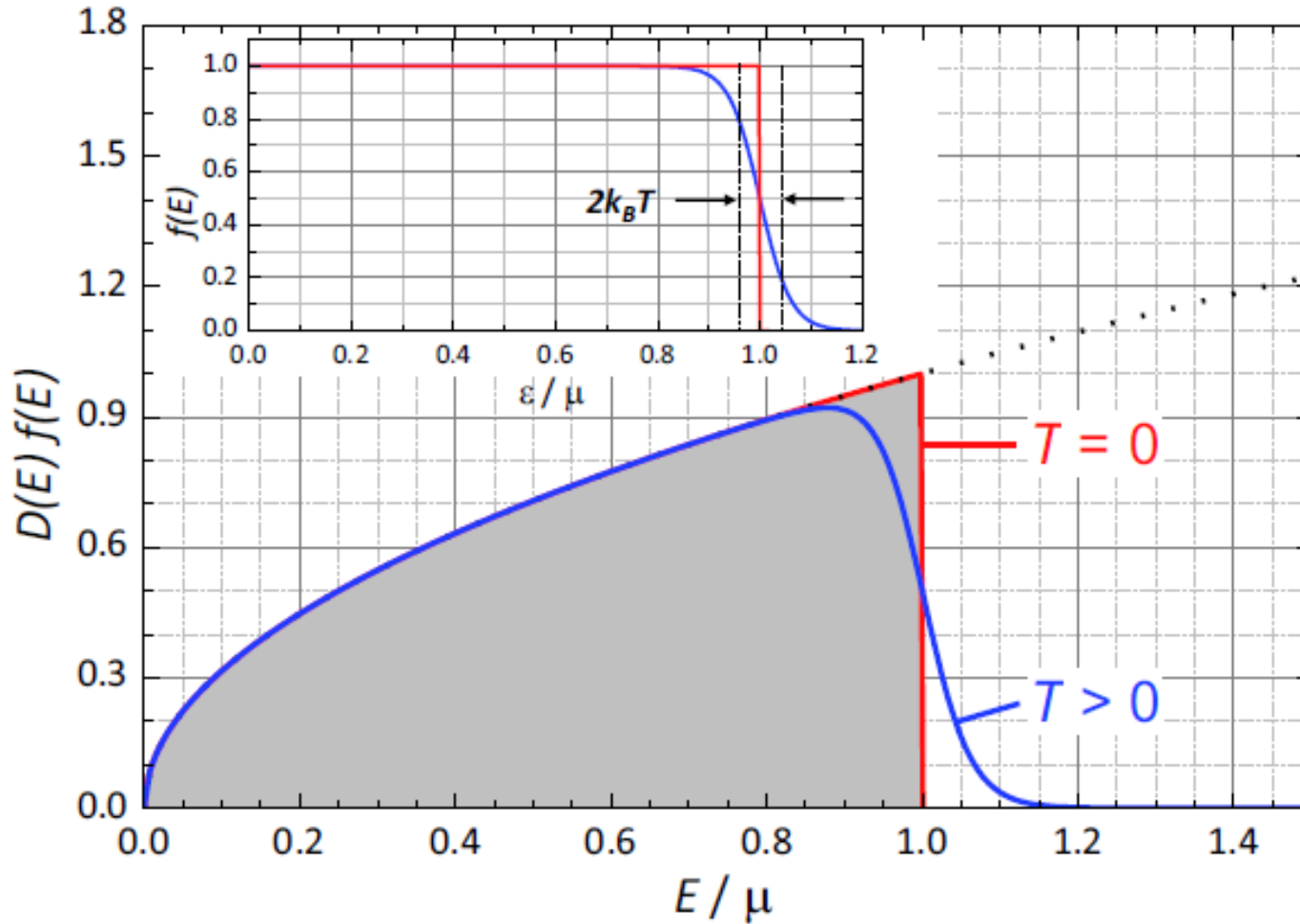
$$v_F \sim 10^8 \text{ cm/s}, \quad T_F \sim 50000 \text{ K} \gg \text{Schmelztemperatur}$$

7.3 Zahlen: Fermi-Energie, Fermi-Kugel,...

Tabelle 6.1. Fermi-Energie E_F^0 , Radius der Fermi-Kugel im k -Raum k_F , Fermi-Geschwindigkeit $v_F = \hbar k_F / m$ und Fermi-Temperatur $T_F = E_F^0 / k_B$ für einige typische Metalle. n ist die Konzentration der Leitungselektronen, ermittelt aus den Strukturdaten der Elemente [6.2]. Dabei ist zu beachten, dass die Elektronenkonfiguration von Cu, Ag und Au $3d^{10}4s^1$ ist, also jedes Atom ein „freies“ Elektron beiträgt (Abb. 7.12). Häufig wird auch der charakteristische Radius r_s verwendet. Er ist definiert durch das Volumen einer gedachten Kugel, die jedes Elektron einnimmt, $4\pi r_s^3/3 = a_0^{-3} n^{-1}$, wobei a_0 der Bohrsche Radius ist, so dass r_s dimensionslos wird. Werte für r_s liegen zwischen 2 und 6 für typische Metalle

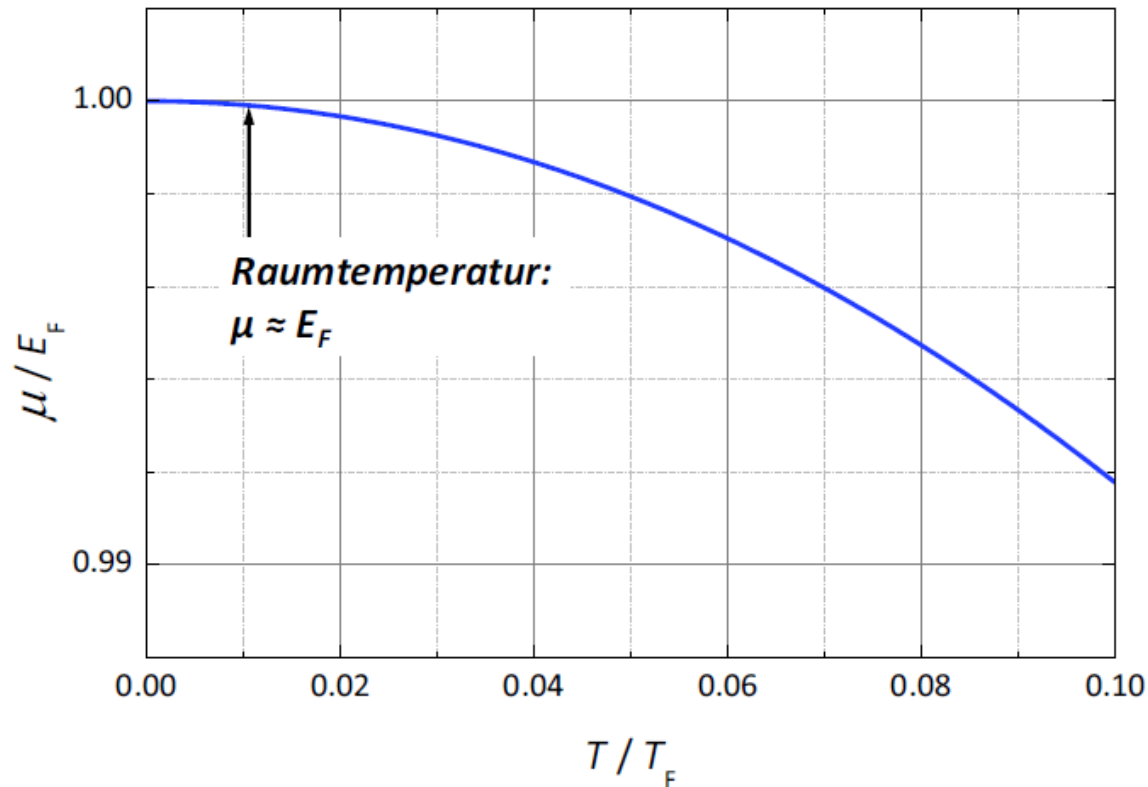
Metall	n (10^{22} cm^{-3})	r_s (-)	k_F (10^8 cm^{-1})	v_F (10^8 cm/s)	E_F^0 (eV)	T_F (10^4 K)
Li	4,62	3,27	1,11	1,29	4,70	5,45
Na	2,53	3,99	0,91	1,05	3,14	3,64
Cs	0,86	5,71	0,63	0,74	1,53	1,78
Al	18,07	2,07	1,75	2,03	11,65	13,52
Cu	8,47	2,67	1,36	1,57	7,03	8,16
Ag	5,86	3,02	1,20	1,39	5,50	6,38
Au	5,9	3,01	1,20	1,39	5,52	6,41

7.3 Zustandsdichtebesetzung bei endlicher Temperatur



Gross, Marx

7.3 Zustandsdichtebesetzung bei endlicher Temperatur



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

mit $T_F = \frac{E_F}{k_B}$

Fermi-Temperatur

Gross, Marx

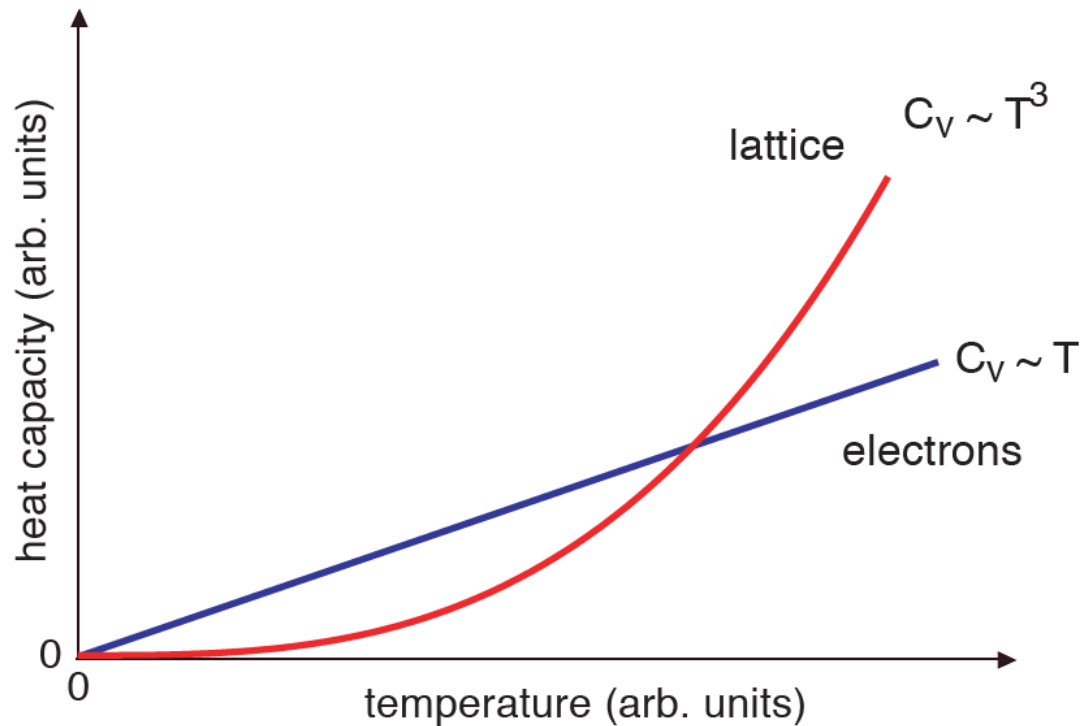
7.3 Innere Energie des freien Elektronengases

Sommerfeld-Entwicklung

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

Änderung der Teilchenzahldichte
mit Temperatur, $\tilde{N} = 0$
(Gross, Marx, Gl. 7.1.47 und 7.2.4.)

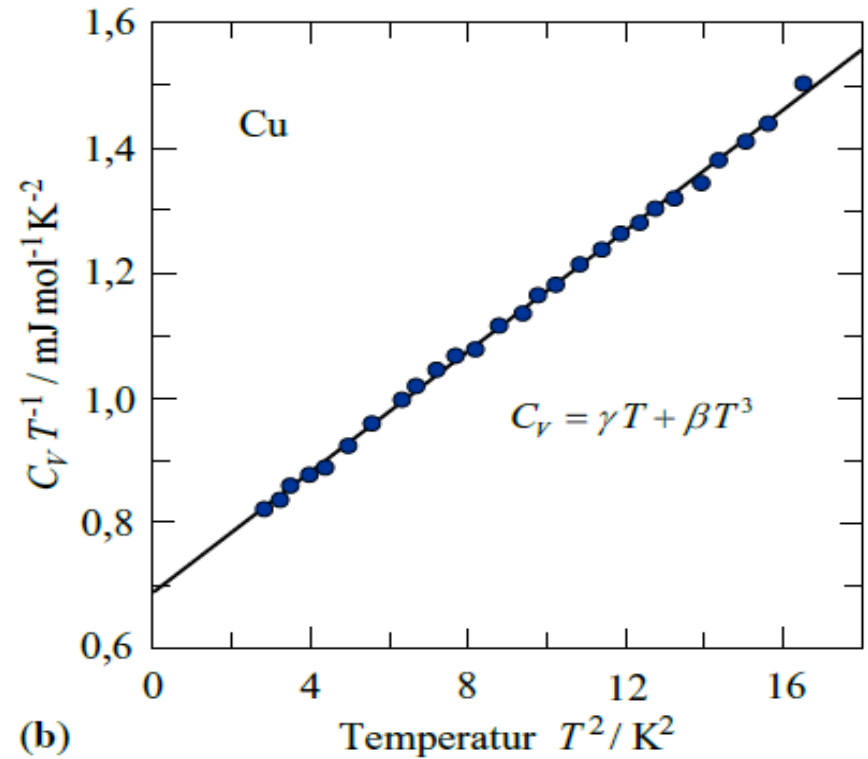
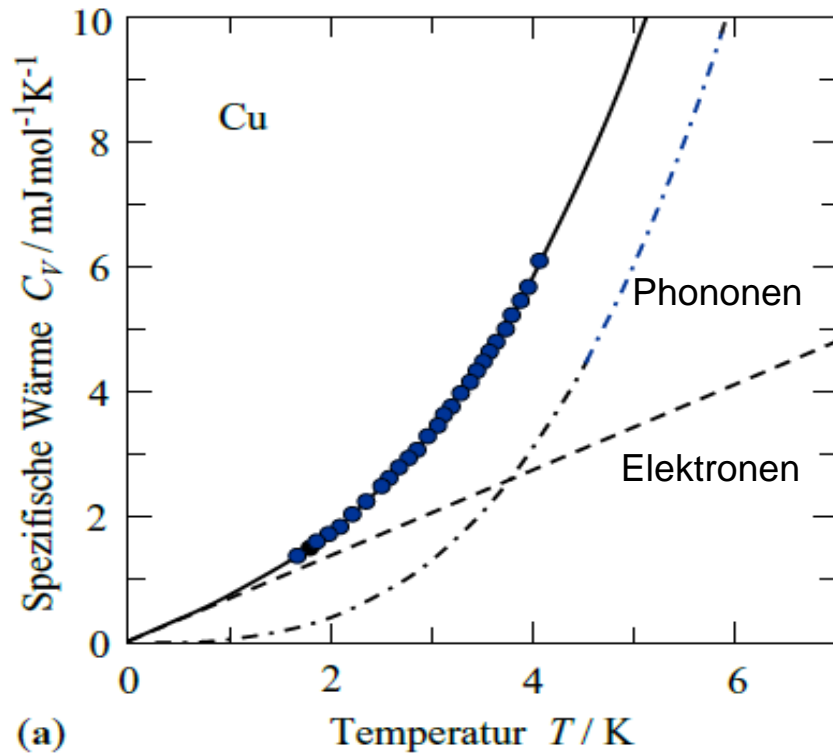
7.4 Spezifische Wärme: Elektronen und Phononen



Zwei Beiträge: **Gitterschwingungen** und **Elektronen**

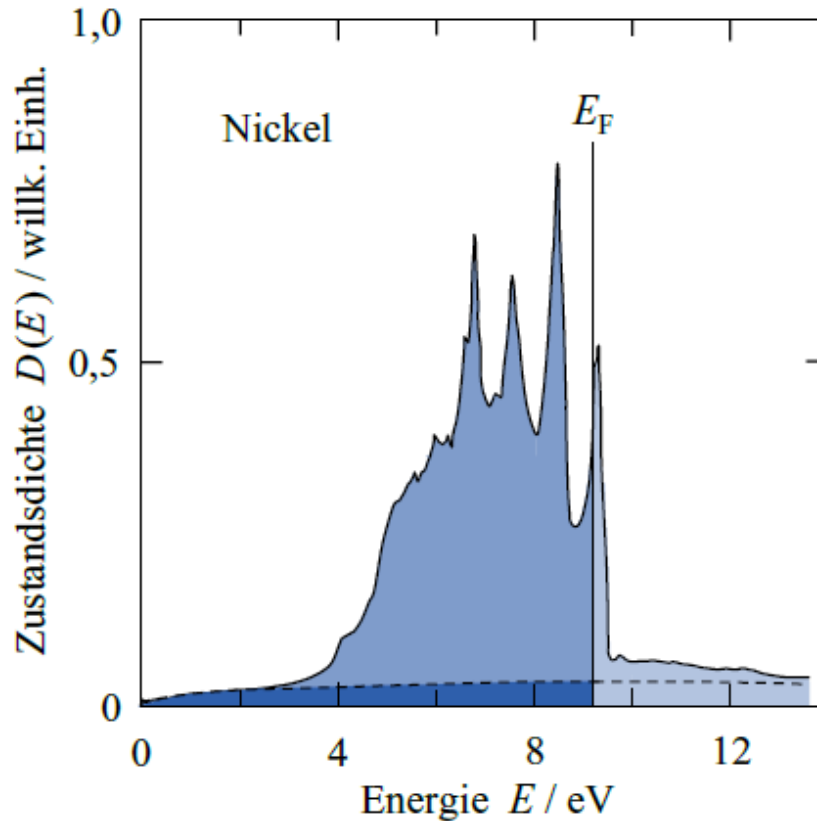
Elektronen: Beitrag unwichtig bei hohen Temperaturen, dominiert aber bei genügend tiefen Temperaturen

7.4 Spezifische Wärme: Elektronen und Phononen



Quelle: Hunklinger

7.4 Spezifische Wärme: Elektronen und Phononen



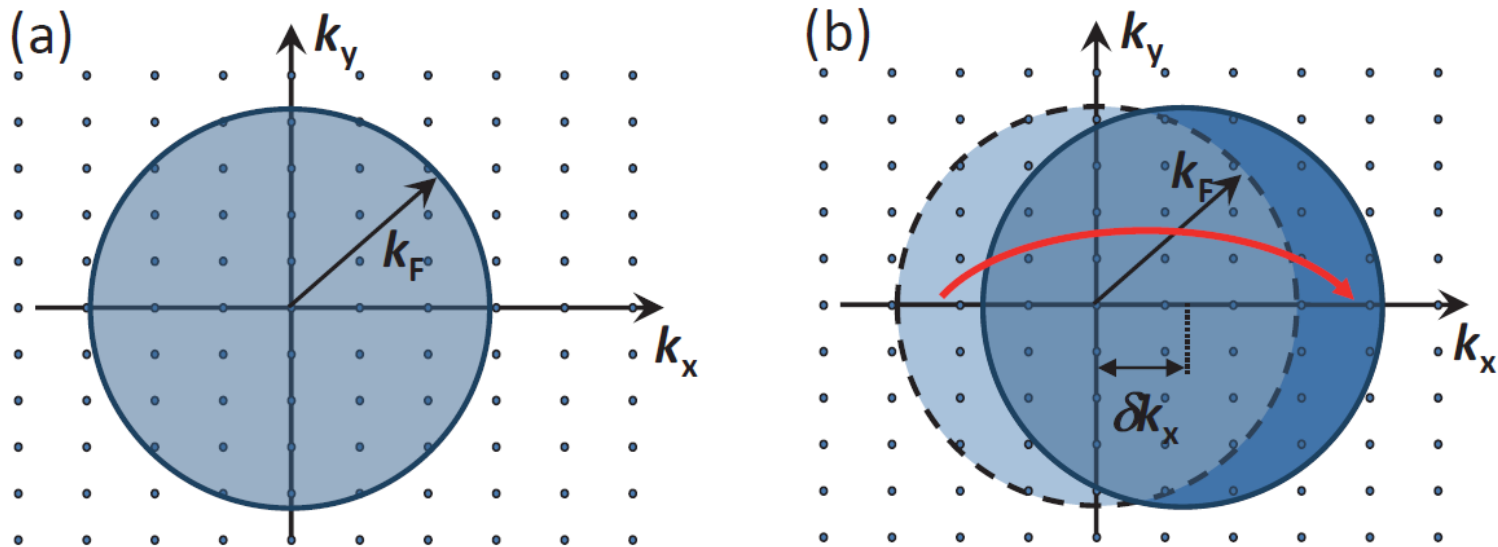
3d-Übergangsmetalle:
Große Abweichungen zwischen
Theorie und Experiment in der spez.
Wärme, aufgrund der d- Elektronen

Quelle: Hunklinger

7.5 Elektrische Leitfähigkeit

Beschleunigung von Elektronen im E-Feld

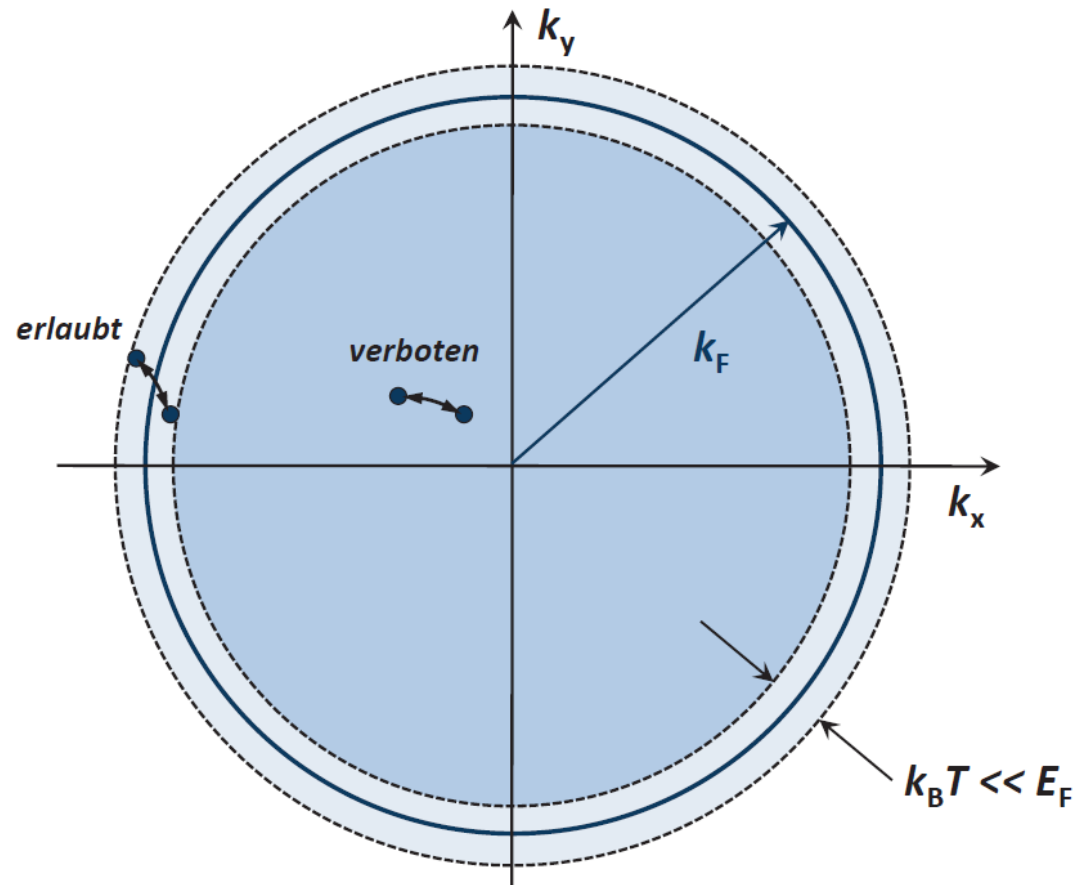
→ Verschiebung der Fermi-Kugel k-Raum



Quelle: Gross, Marx

7.5 Elektrische Leitfähigkeit

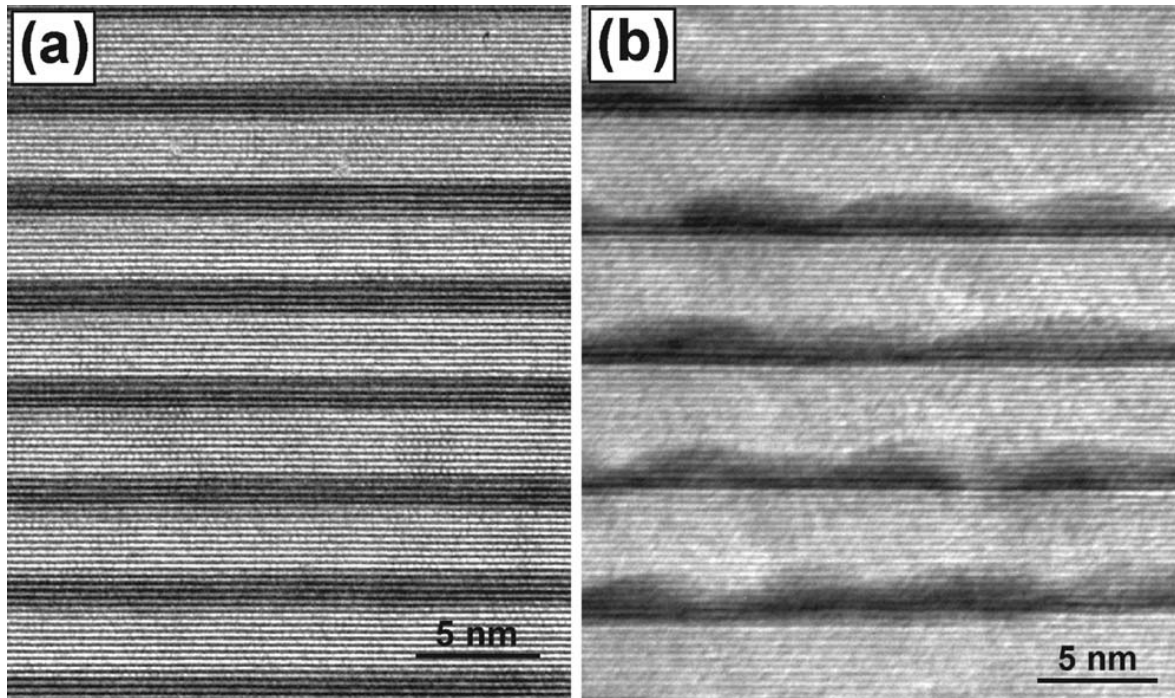
Erlaubte Streuprozesse am Rand der Fermi-Kugel



Quelle: Gross, Marx

7.7 Zweidimensionales Elektronengas

Beispiele Quantenfilme und Quantenpunkte



GaN quantum dots
in AlN matrix,
grown by MBE

Transmission electron microscopy
image (cross section)

7.7 Zweidimensionales Elektronengas

Wellenfunktion als Produktansatz:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \phi_n(z) e^{i(k_x x + k_y y)} = \phi_n(z) e^{i\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \mathbf{r}}$$

Schrödinger-Gl. senkrecht und parallel zur QW-Ebene:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \right] e^{i\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \mathbf{r}} = E_{\parallel} e^{i\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \mathbf{r}}$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - eV(z) \right] \phi_n(z) = \epsilon_n \phi_n(z)$$

Ebene Welle (parallel):

$$E_{\parallel} = \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m}$$

Gebundener Zustand (senkrecht; quantum confinement) :

$$\phi(z) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ik_{z,n}z} & \text{für } -\frac{L}{2} \leq z \leq +\frac{L}{2} \\ 0 & \text{für } |z| > \frac{L}{2} \end{cases}$$

Quelle: Gross, Marx

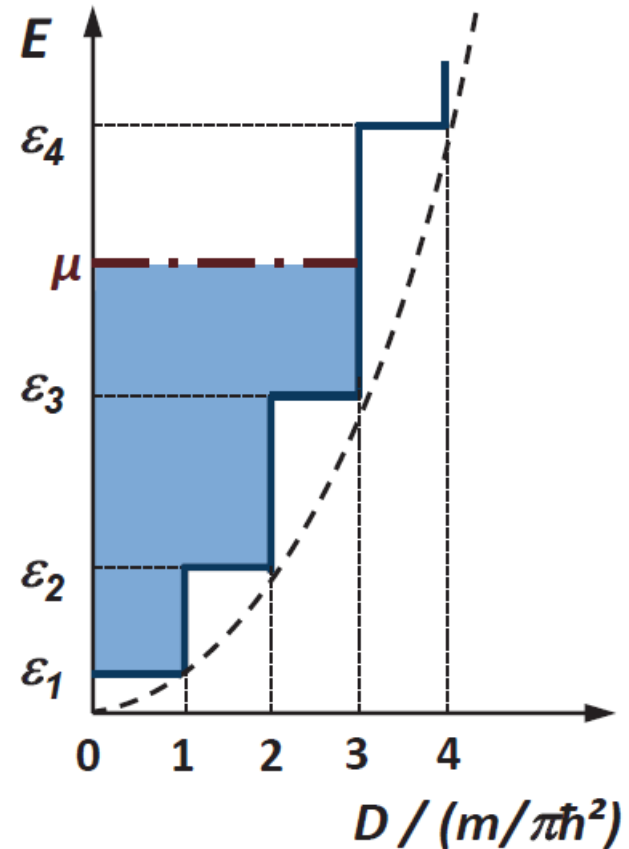
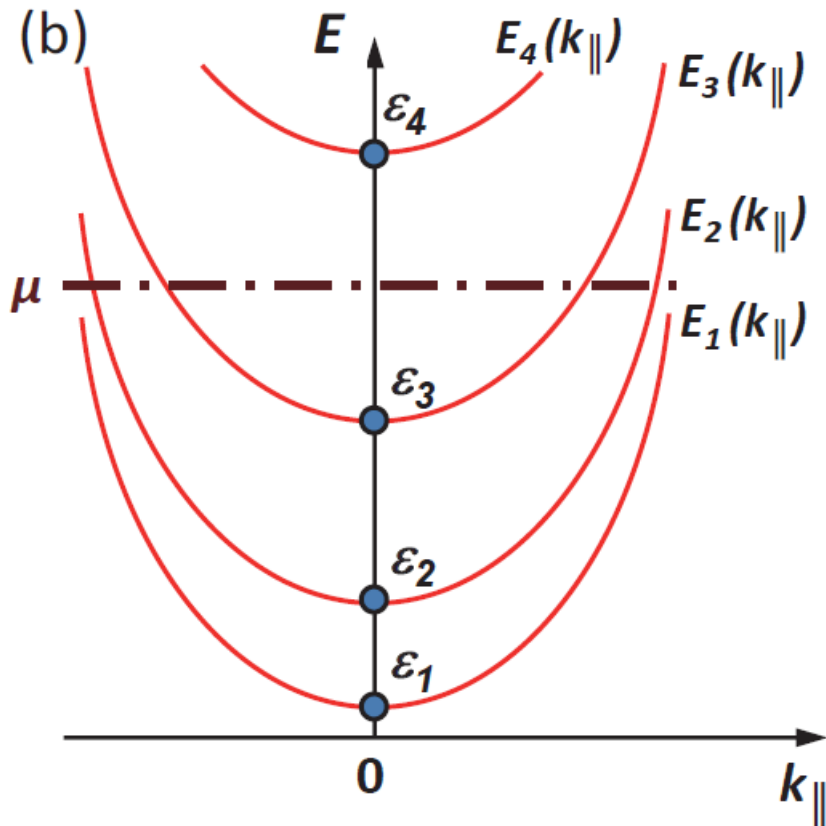
7.7 Zweidimensionales Elektronengas

Energie:

$$E_n = E_{\parallel} + \epsilon_n = \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m} + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m L^2} n^2$$

Zustandsdichte:

$$D_n^{(2D)}(E) = \begin{cases} \frac{A}{2\pi} \frac{2m}{\hbar^2} = \text{const} & \text{für } E \geq \epsilon_n \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$



Quelle: Gross, Marx

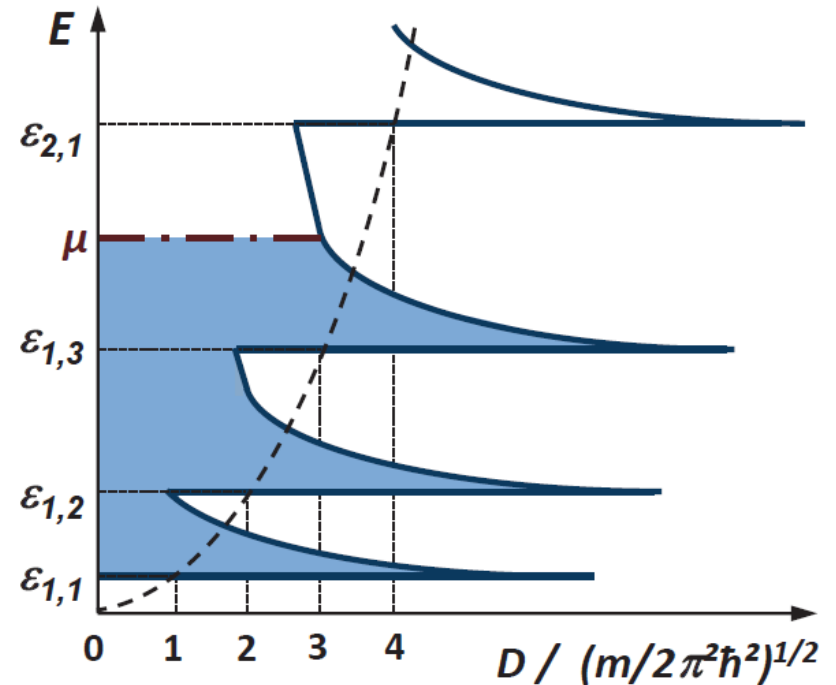
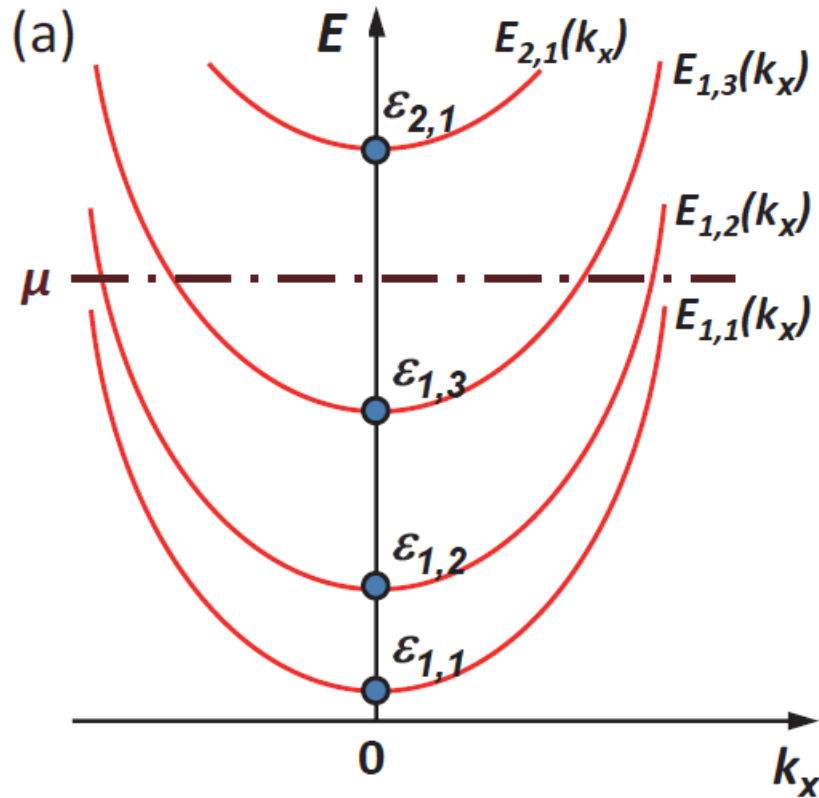
7.7 Eindimensionales Elektronengas

Energie:

$$E_{n_1, n_2} = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + \epsilon_{n_1, n_2} = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m L_z^2} n_1^2 + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m L_y^2} n_2^2$$

Zustandsdichte:

$$D_{n_1, n_2}^{(1D)}(E) = \begin{cases} \frac{L}{2\pi} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{1/2} (E - \epsilon_{n_1, n_2})^{-1/2} & \text{für } E \geq \epsilon_{n_1, n_2} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$



Quelle: Gross, Marx