

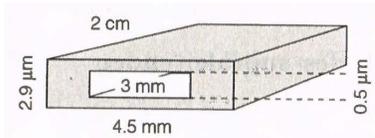
# Übungen zur Vorlesung Festkörperphysik 2 WS 2019/20

## Serie 3

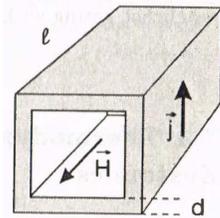
**Aufgabe 1** Lesen des beiliegenden Texts zur Austauschwechselwirkung. Fragen dazu mündlich.

**Aufgabe 2** aus den Zulassungsaufgaben zum Graduiertenstudium einer US-Uni

QUINN und ITTNER führten zur Abschätzung des elektrischen Widerstandes von Supraleitern einen Dauerstromversuch durch. Sie nutzten dazu eine in Dünnschichttechnik hergestellte Bleiprobe mit der abgebildeten Geometrie.



(a) Die folgende Abbildung zeigt einen Hohlkörper, dessen Wand (Dicke  $d$ ) von einem elektrischen Strom der Stromdichte  $j$  durchflossen wird. Die Länge  $l$  des Körpers sei wesentlich größer als dessen Querabmessungen. Zeigen Sie mit Hilfe des Ampereschen Gesetzes, dass im Innern des Hohlkörpers ein homogenes Magnetfeld der Stärke  $H = jd$  herrscht, und berechnen Sie damit die Induktivität  $L$  des Körpers.



(b) Eine Messung des in der Bleiprobe eingefangenen magnetischen Flusses ergab, dass der zu Beginn des Experiments in der Probe induzierte Strom innerhalb von 7 Stunden um weniger als 2% abgenommen hatte. Betrachten Sie die Anordnung von QUINN und ITTNER als eine elektrische  $RL$ -Serienschaltung, und schätzen Sie auf diese Weise eine Obergrenze für den elektrischen Widerstand  $R$  des Stromkreises ab!

(c) Schätzen Sie ab, um welchen Faktor der spezifische Widerstand von Blei ( $\rho = 22\mu\Omega\text{ cm}$  bei 300 K) durch den Übergang zur Supraleitung verringert wird.

(d) Weshalb haben sich die Experimentatoren Mühe gegeben, die innere Querschnittsfläche der Probe möglichst gering zu halten? Und warum ist sie nicht quadratisch?

**Aufgabe 3** aus den Zulassungsaufgaben zum Graduiertenstudium einer US-Uni

Name at least one experimenter and one theorist who contributed to the understanding of each of the following phenomena, and give (approximate) dates for their work. (a) Superconductivity (b) The photoelectric effect (c) Wave properties of the electron (d) Electron spin

Aus R. Gross, A. Marx, Festkörperphysik (Oldenbourg)

## 12.5.6 Austauschwechselwirkung zwischen itineranten Elektronen

Für typische Bandferromagnete wie z. B. Ni, Co oder Fe versagt die Beschreibung im Rahmen eines Heisenberg-Modells, in die nur die paarweise Wechselwirkung zwischen Elektronen eingeht. Es muss hier die kollektive Austauschwechselwirkung eines Elektrons mit dem gesamten Elektronengas einbezogen werden. Wir werden zuerst als instruktives Beispiel den Austausch zwischen nur zwei freien Elektronen diskutieren und dann auf die Austauschwechselwirkung von Elektronen in einem freien Elektronengas als Grundlage für den Bandferromagnetismus in Metallen eingehen.

### 12.5.6.1 Vertiefungsthema: Austauschwechselwirkung zwischen freien Elektronen

Wir betrachten zwei freie Elektronen  $i$  und  $j$  und ihre Paarwellenfunktion  $\Psi_{ij}$ . Für zwei Elektronen mit gleichem Spin muss die Paarwellenfunktion im Ortsraum antisymmetrisch

sein:

$$\begin{aligned}\Psi_{ij} &= \frac{1}{\sqrt{2}V} \left( e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}_i} e^{i\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}_j} - e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}_j} e^{i\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}_i} \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}V} e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}_i} e^{i\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}_j} \left( 1 - e^{-i(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_j) \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \right).\end{aligned}\quad (12.5.26)$$

Die Wahrscheinlichkeit dafür, das Elektron  $i$  im Volumenelement  $d^3 r_i$  und das Elektron  $j$  im Volumenelement  $d^3 r_j$  zu finden, ist gegeben durch

$$|\Psi_{ij}|^2 d^3 r_i d^3 r_j = \frac{1}{V^2} \left[ 1 - \cos\{(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_j) \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)\} \right] d^3 r_i d^3 r_j.\quad (12.5.27)$$

Dieser Ausdruck zeigt einige interessante Aspekte. Erstens ist die Wahrscheinlichkeit dafür, zwei Elektronen mit gleichem Spin am gleichen Ort zu finden, gleich null. Zweitens können als Folge davon für ein bestimmtes Spin- $\uparrow$ -Elektron alle anderen Elektronen mit gleicher Spin-Richtung lokal das Coulomb-Potenzial der Ionenrümpfe nicht effektiv abschirmen. Dies führt insgesamt zu einer höheren Bindungsenergie des Spin- $\uparrow$ -Elektrons, also zu einer Energieabsenkung. Dieser Energiegewinn wird optimiert, wenn ein möglichst großer Anteil der Elektronen mit gleicher Richtung vorliegt. Wir erhalten also eine Energieabsenkung für parallele Spin-Orientierung und eine kollektive Austauschwechselwirkung mit positivem Vorzeichen. Wie wir weiter unten noch diskutieren werden, müssen wir aber neben der Absenkung der potenziellen Energie auch die Zunahme der kinetischen Energie berücksichtigen. Welcher Zustand sich dann im Einzelfall einstellt, wird durch das subtile Wechselspiel dieser beiden Energieänderungen bestimmt (siehe hierzu Stoner-Kriterium in Abschnitt 12.5.6.2).

Wir wollen kurz die Bedeutung von (12.5.27) weiter diskutieren. Um eine  $k$ -gemittelte Wahrscheinlichkeit zu erhalten, mitteln wir über die Fermi-Kugel. Mit der Relativkoordinate  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$  können wir die Wahrscheinlichkeit dafür, das zweite Spin- $\uparrow$ -Elektron im Volumenelement  $d^3 r$  im Abstand  $\mathbf{r}$  vom ersten zu finden, schreiben als

$$P(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = n_{\uparrow} d^3 r \left[ 1 - \cos(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_j) \cdot \mathbf{r} \right].\quad (12.5.28)$$

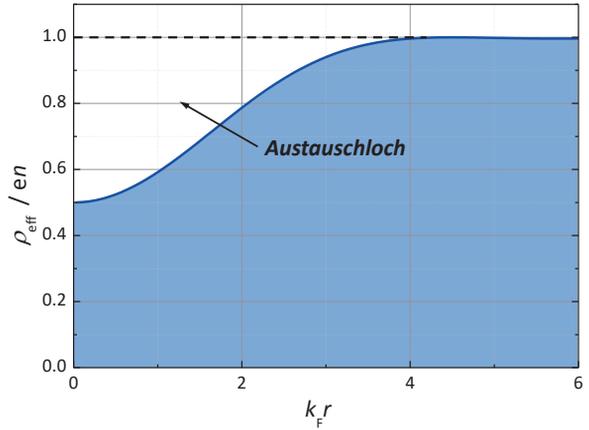
Hierbei ist  $n_{\uparrow} = n/2$  die Dichte der Spin- $\uparrow$ -Elektronen. Statt von der Wahrscheinlichkeit  $P$  können wir auch von einer effektiven Elektronendichte  $\rho$  sprechen, die auf das Spin- $\uparrow$ -Elektron wirkt:

$$\begin{aligned}\rho(\mathbf{r}) &= \frac{en}{2} \overline{\left[ 1 - \cos(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_j) \cdot \mathbf{r} \right]} \\ &= \frac{en}{2} \left\{ 1 - \frac{1}{\left[ \frac{4}{3} \pi k_F^3 \right]^2} \int d^3 k_i \int d^3 k_j \frac{1}{2} \left( e^{+i(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_j) \cdot \mathbf{r}} + e^{-i(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_j) \cdot \mathbf{r}} \right) \right\} \\ &= \frac{en}{2} \left\{ 1 - \frac{1}{\left[ \frac{4}{3} \pi k_F^3 \right]^2} \int d^3 k_i e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}_i} \int d^3 k_j e^{i\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}_j} \right\}.\end{aligned}\quad (12.5.29)$$

Lösen des Integrals ergibt

$$\rho(\mathbf{r}) = \frac{en}{2} \left\{ 1 - 9 \frac{(\sin k_F r - k_F r \cos k_F r)^2}{(k_F r)^6} \right\}.\quad (12.5.30)$$

Abb. 12.17: Normierte effektive Ladungsdichte  $\rho_{\text{eff}}/ne$ , die von einem Elektron in einem freien Elektronengas gesehen wird. Aufgrund der Austauschwechselwirkung ist die Elektronendichte der Elektronen mit gleicher Spinrichtung in unmittelbarer Umgebung reduziert. Je-ede Elektron bohrt sich sozusagen ein „Austauschloch“ in die Elektronendichte gleicher Spin-Richtung.



Die gesamte Ladungsdichte, die von dem Spin- $\uparrow$ -Elektron gesehen wird, setzt sich aus (12.5.30) und der homogenen Dichte  $\frac{en}{2}$  der Spin- $\downarrow$ -Elektronen zusammen. Wir erhalten also insgesamt:

$$\rho_{\text{eff}}(\mathbf{r}) = en \left\{ 1 - \frac{9}{2} \frac{(\sin k_F r - k_F r \cos k_F r)^2}{(k_F r)^6} \right\}. \quad (12.5.31)$$

Diese Ladungsdichte ist in Abb. 12.17 gezeigt. Wir sehen, dass in der unmittelbaren Umgebung eines Elektrons die Ladungsdichte aufgrund der Austauschwechselwirkung reduziert ist. Wir sprechen von einem „Austauschloch“. Die räumliche Ausdehnung dieses Austauschlochs beträgt etwa  $2/k_F \sim 1 - 2 \text{ \AA}$ .<sup>49</sup>

Um abzuleiten, ob durch die Austauscheffekte im Elektronengas eine parallele oder antiparallele Spin-Orientierung bevorzugt wird, müssen wir eine energetische Betrachtung machen. Wenn das Austauschloch die Energie des Systems verringert, werden alle Elektronen versuchen hiervon Gebrauch zu machen und ihre Spins in eine Richtung zu stellen. Falls das Austauschloch die Energie erhöhen sollte, werden die Elektronen die Energie dadurch minimieren, dass sie ihre Spins antiparallel stellen. Die Energie des Austauschlochs besteht aus zwei Beiträgen, der Coulomb-Energie und der kinetischen Energie. Auf der einen Seite erfolgt durch das Austauschloch eine Energieabsenkung aufgrund der verringerten Abschirmung der Ionenrümpfe. Auf der anderen Seite lokalisieren wir das Elektron im Austauschloch, was aufgrund der Unschärferelation zu einer Erhöhung der kinetischen Energie führt. Da der Radius des Austauschlochs etwa  $1/k_F$  beträgt, können wir  $\delta p \sim \hbar/\Delta x \sim \hbar k_F$  schreiben und erhalten die Erhöhung der kinetischen Energie zu  $\Delta E_{\text{kin}} \sim \delta p^2/2m^* \propto k_F^2/m^*$ . Um die Erhöhung der kinetischen Energie klein zu halten, brauchen wir also eine große effektive Masse und einen kleinen Fermi-Wellenvektor, d. h. eine niedrige Elektronendichte. Die Absenkung der Coulomb-Energie geht proportional zum inversen Radius des Austauschlochs,

<sup>49</sup> Wir wollen noch darauf hinweisen, dass die effektive Ladungsdichte  $\rho_{\text{eff}}$  dazu benutzt werden kann, eine neue, renormalisierte Schrödinger-Gleichung zu formulieren. Dies führt uns zur Hartree-Fock-Näherung. Ferner sei darauf hingewiesen, dass die in (12.5.31) enthaltenen Korrelationen zwischen beliebig weit voneinander entfernten Elektronen daher resultieren, dass wir den unrealistischen Ansatz ebener Wellen gemacht haben.

also proportional zu  $k_F$ . Wir stellen also insgesamt fest, dass es vorteilhaft für die Elektronen ist, ihre Spins parallel auszurichten, wenn die effektive Masse groß und/oder die Elektronendichte klein ist, denn dann ist die Energieabsenkung durch die reduzierte Coulomb-Energie größer als die Energieerhöhung durch die Zunahme der kinetischen Energie. Eine große effektive Masse erhalten wir für flache Energiebänder, die wiederum mit einer hohen Zustandsdichte verbunden sind. Dieses Szenario liegt z. B. bei Systemen mit Leitungselektronen vor, die aus relativ stark lokalisierten  $3d$ ,  $4f$  oder  $5f$  Zuständen stammen.

### 12.5.6.2 Bandferromagnetismus in Metallen

Wir wollen in diesem Abschnitt ein einfaches Modell für den so genannten Bandferromagnetismus entwickeln, mit dem wir den ferromagnetischen Austausch in einem System freier Elektronen verstehen können. Dieses Modell geht auf Überlegungen von Stoner<sup>50</sup> zurück.<sup>51</sup> Wir nehmen an, dass durch die Korrelationen unter den Elektronen mit gleicher Spin-Richtung die Ein-Elektronenniveaus renormalisiert werden. Da durch die Austauscheffekte im Elektronengas eine parallele Spin-Richtung bevorzugt wird, nehmen wir an, dass einige Spin- $\downarrow$ -Elektronen in Spin- $\uparrow$ -Zustände umverteilt werden. Dies führt aber zu einer Erhöhung der kinetischen Energie der umverteilten Elektronen um  $\delta E$  (siehe Abb. 12.18). Durch die Umverteilung haben wir die Zahl der Spin- $\uparrow$ -Elektronen um

$$\delta N = \frac{1}{2} D(E_F) \delta E \quad (12.5.32)$$

erhöht und die Zahl der Spin- $\downarrow$ -Elektronen um die gleiche Zahl erniedrigt. Dies führt zu einer Erhöhung der kinetischen Energiedichte des Elektronensystems um

$$\Delta E_{\text{kin}} = \frac{\delta N}{V} \cdot \delta E = \frac{1}{2V} D(E_F) (\delta E)^2. \quad (12.5.33)$$

Wir müssen nun überlegen, unter welchen Bedingungen diese Erhöhung der kinetischen Energie kompensiert werden kann, so dass

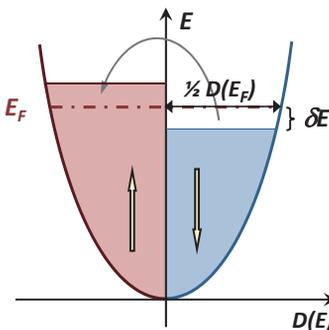


Abb. 12.18: Umverteilung von Spin- $\downarrow$ -Elektronen in Spin- $\uparrow$ -Zustände in einem Bandferromagneten. Die Umverteilung führt zu einer Erhöhung der kinetischen Energie.

<sup>50</sup> Edmund Clifton Stoner, geboren am 2. Oktober 1899 in Surrey, England, gestorben am 27. Dezember 1968 in Leeds, England.

<sup>51</sup> E. C. Stoner, Proc. Roy. Soc. London A 165 372–414 (1938) und Proc. Roy. Soc. London A 169, 339–371 (1939).

insgesamt eine Energieerniedrigung stattfindet. Mit den Elektronenzahlen

$$N_{\uparrow,\downarrow} = \frac{N}{2} \pm \frac{1}{2} D(E_F) \delta E = \frac{N}{2} \pm \delta N \quad (12.5.34)$$

und den entsprechenden Dichten

$$n_{\uparrow,\downarrow} = \frac{N}{2V} \pm \frac{1}{2V} D(E_F) \delta E = \frac{n}{2} \pm \delta n \quad (12.5.35)$$

für die beiden Spin-Richtungen erhalten wir die Magnetisierung<sup>52</sup>

$$M_A = -\frac{1}{2} g_s \mu_B (n_{\uparrow} - n_{\downarrow}) = -\mu_B \frac{D(E_F)}{V} \delta E. \quad (12.5.36)$$

Hierbei haben wir  $g_s \approx 2$  verwendet. Wir können nun auch so argumentieren, dass diese Magnetisierung durch ein fiktives inneres *Molekularfeld*  $B_A = \mu_0 \gamma M_A$  zustande gekommen ist, wobei  $\gamma$  die Molekularfeldkonstante ist. Die mittlere Erniedrigung der potenziellen Energiedichte können wir dann schreiben als

$$\Delta E_{\text{pot}} = - \int_0^{B_A} M dB = -\mu_0 \gamma \int_0^{M_A} M dM = -\frac{1}{2} \mu_0 \gamma M_A^2. \quad (12.5.37)$$

Setzen wir den Ausdruck für  $M_A$  ein, so ergibt sich

$$\begin{aligned} \Delta E_{\text{pot}} &= -\frac{1}{2} \mu_0 \mu_B^2 \gamma \left[ \frac{D(E_F)}{V} \delta E \right]^2 = -\frac{1}{4V} U (2\delta N)^2 \\ &= -\frac{1}{4V} U (N_{\uparrow} - N_{\downarrow})^2 = -\frac{1}{4} UV (n_{\uparrow} - n_{\downarrow})^2. \end{aligned} \quad (12.5.38)$$

Hierbei ist

$$U = 2\mu_0 \mu_B^2 \gamma / V \quad (12.5.39)$$

die charakteristische Energiedichte, die wir aufgrund der Coulomb-Wechselwirkung im Elektronengas für jedes Elektronenpaar mit entgegengesetzter Spin-Richtung (z. B. durch gelegentlichen gleichzeitigen Aufenthalt im gleichen Orbital) bezahlen müssen. Um von Gleichung (12.5.38) plausibel zu machen, bestimmen wir zunächst die Anzahl von Elektronenpaaren mit parallelem Spin. Da jedes Elektron mit jedem anderen ein Paar bilden kann, ist die Gesamtzahl der Paare mit Spin nach oben etwa  $\frac{1}{2} (N_{\uparrow})^2 = \frac{1}{2} (\frac{N}{2} + \delta N)^2$ , wobei die Selbstpaare, die hier in verschwindender Größe eingehen, nicht berücksichtigt werden. Die Austauschenergie, um die die Gesamtenergie abgesenkt wird, beträgt gerade  $U$  mal der Anzahl der Paare, also  $-\frac{U}{2} (\frac{N}{2} + \delta N)^2$ . Genauso ergibt sich für die Elektronen mit Spin nach unten  $-\frac{U}{2} (\frac{N}{2} - \delta N)^2$  und damit insgesamt für beide Spin-Richtungen  $-\frac{U}{4} N^2 - U(\delta N)^2$ . Der erste Term gibt hier die Energie bei Gleichbesetzung der beiden Spin-Richtungen an und die Änderung bei einer Ungleichbesetzung der beiden Spin-Richtungen ist deshalb durch  $-U(\delta N)^2$  gegeben. Mit  $\delta N = \frac{1}{2} (N_{\uparrow} - N_{\downarrow})$  erhalten wir dann die Änderung der potenziellen Energiedichte zu  $\Delta E_{\text{pot}} = -\frac{U}{4V} (N_{\uparrow} - N_{\downarrow})^2 = -\frac{1}{4} UV (n_{\uparrow} - n_{\downarrow})^2$ .

<sup>52</sup> Hierbei müssen wir wiederum beachten, dass das magnetische Moment antiparallel zur Spin-Richtung orientiert ist.

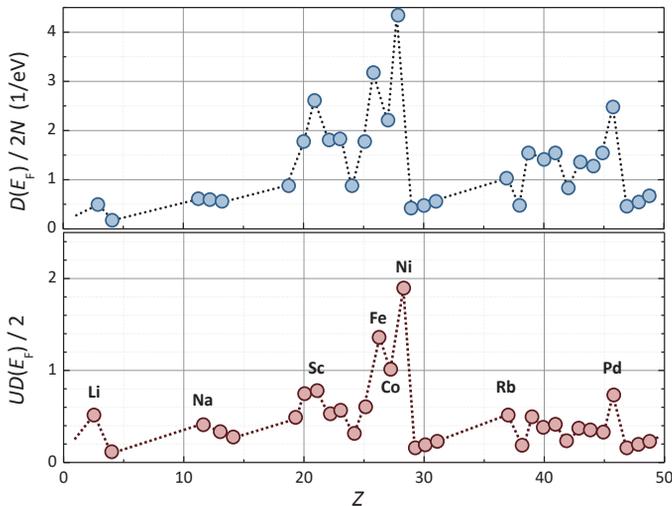


Abb. 12.19: Zustandsdichte pro Atom und Spin-Richtung (a) und Stoner-Parameter  $\frac{1}{2}UD(E_F)$  als Funktion der Ordnungszahl  $Z$  (Daten aus J. F. Janak, Phys. Rev. B 16, 255–262 (1977)).

Für die gesamte Änderung der Energiedichte erhalten wir mit Hilfe von (12.5.33) und (12.5.38)

$$\Delta E = \Delta E_{\text{kin}} + \Delta E_{\text{pot}} = \frac{1}{2V} D(E_F) (\delta E)^2 \left[ 1 - \frac{1}{2} UD(E_F) \right]. \quad (12.5.40)$$

Wir sehen, dass wir insgesamt eine Absenkung der Energiedichte erhalten, wenn wir die Bedingung

$$\frac{1}{2} UD(E_F) > 1 \quad (12.5.41)$$

erfüllen. Diese Bedingung bezeichnet man als **Stoner-Kriterium**. Ist die Stoner-Bedingung erfüllt, ist es für das Elektronengas vorteilhaft, seine Spins parallel auszurichten, da die damit verbundene Erhöhung der kinetischen Energiedichte durch die Absenkung der potenziellen Energiedichte überkompensiert wird. Das Elektronengas nimmt dann einen ferromagnetischen Zustand ein.<sup>53</sup> Wie Abb. 12.19 zeigt, ist das nur für Fe, Co und Ni der Fall. Gleichung (12.5.41) zeigt, dass wir das Stoner-Kriterium erfüllen können, wenn wir eine hohe Zustandsdichte am Fermi-Niveau und/oder eine hohe Korrelationsenergie  $U$  haben. Dies

<sup>53</sup> Unsere Überlegungen haben wir nur für die Temperatur  $T = 0$  gemacht. Die Betrachtung kann aber leicht auf endliche Temperaturen ausgedehnt werden. Man muss dazu bei der Berechnung der Differenz der Besetzungszahlen von Spin- $\uparrow$ -Elektronen und Spin- $\downarrow$ -Elektronen die Fermi-Verteilung berücksichtigen. Tut man das, so erhält man ein Stoner-Kriterium

$$\frac{1}{2} U \int_0^{\infty} dE D(E) \left( \frac{\partial f(E, T)}{\partial E} \right)_T > 1,$$

in dem auch die Temperatur auftaucht. Das Kriterium wird dann nur unterhalb einer bestimmten Temperatur, der Curie-Temperatur  $T_C$  erfüllt. Das heißt, der ferromagnetische Zustand ist nur für  $T \leq T_C$  stabil.

wird für einige  $3d$ -Übergangsmetalle ( $Z = 21$  bis  $30$ ) erfüllt, die aufgrund der schmalen  $d$ -Bänder eine sehr hohe Zustandsdichte pro Atom und Spin-Richtung haben (siehe Abb. 12.19 oben).