Modell freier Elektronen, Sommerfeld & Bethe 1933

'Damokles-Schwert' spezifische Wärme: Dulong-Petit Gesetz gut erfüllt,

aber wo bleiben dann die Elektronen? (Lösung: Boltzmann ↔ Fermi)

Annahmen zur Beschreibung betrifft nur Leitungselektronen

- adiabatische oder Born-Oppenheimer Näherung

  Trennung von Kernbewegung & elektronischen Freiheitsgraden

- Ein-Elektronen-Näherung

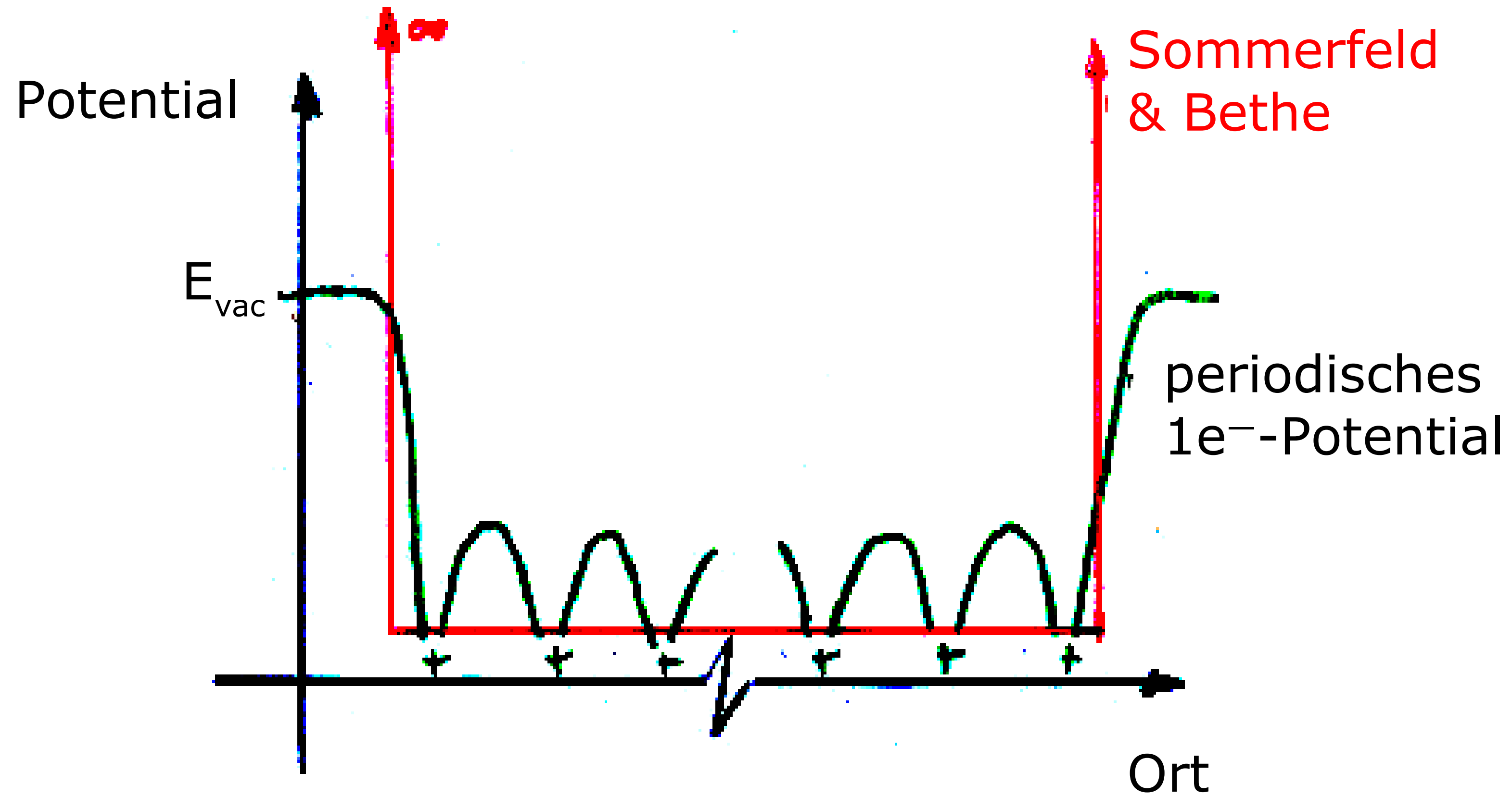
  Festkörper (Ionen & Elektronen) beschrieben durch

  Potential, dessen Eigenzustände aufgefüllt werden

  (# Supraleitung, Magnetismus)

- Freies Elektronengas (Potential V = 0)

Zusammengefasst: Metall = 3D-Potentialtopf

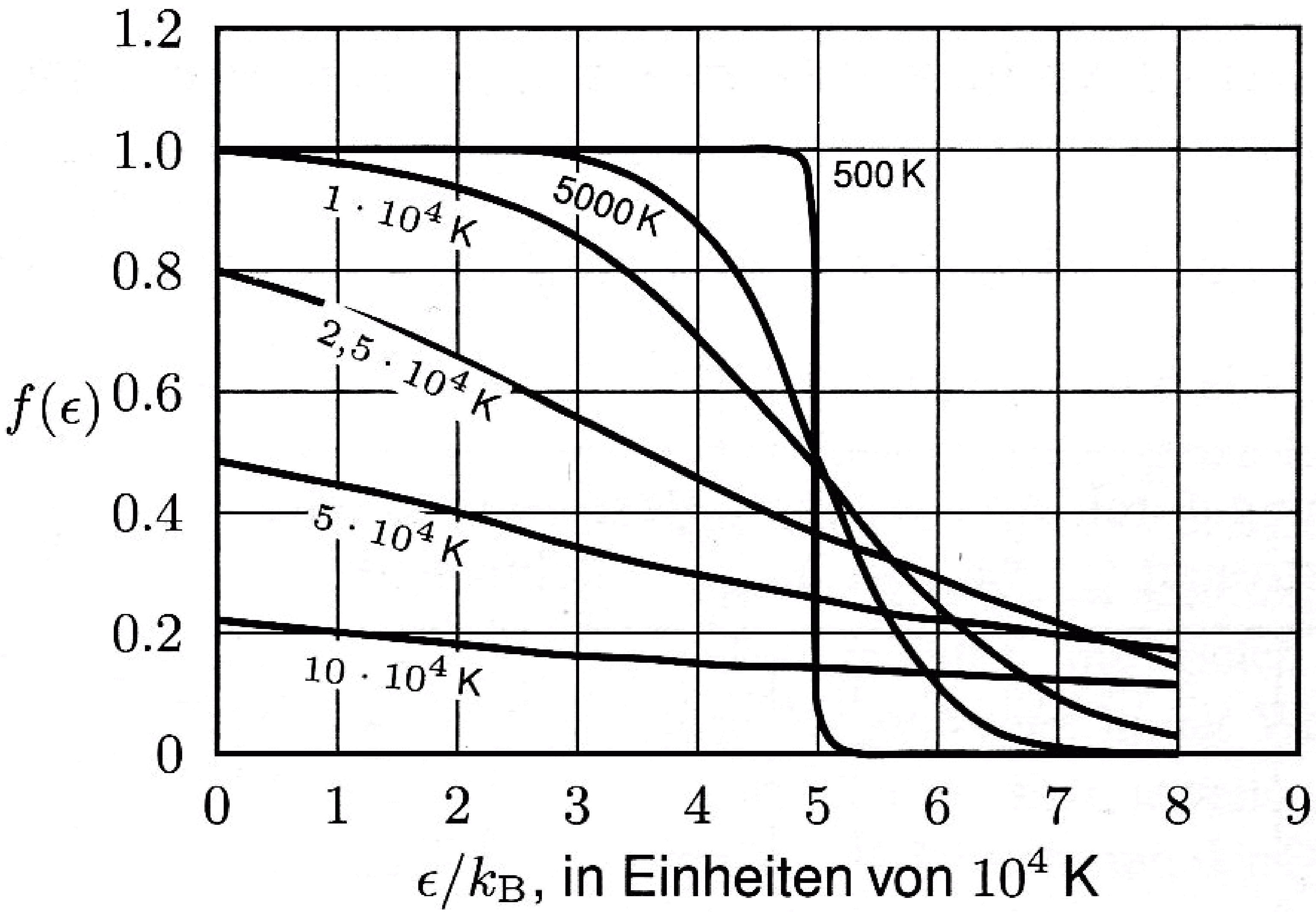


Warum sind Elektronen nahezu frei?

- Elektron-Ion-WW am stärksten bei kleinen r
  dort verhindert Pauliprinzip Elektronenanhäufung
- Mobilität der Leitungselektronen führt zu Abschirmung

Fermiverteilung

1



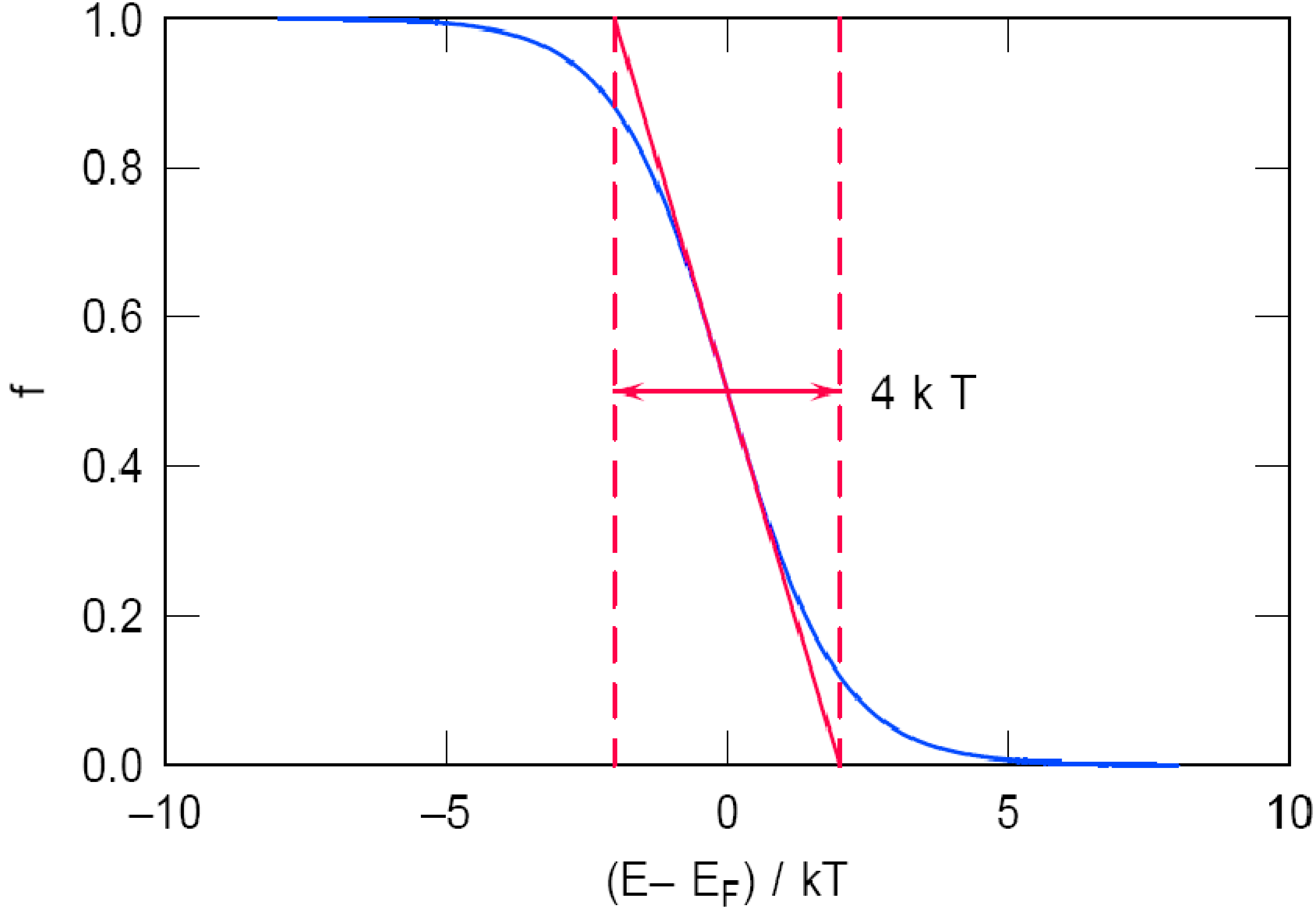
Fermi-Dirac-Verteilung für $T_F = E_F / k_B = 50\,000$ K.

$f(\varepsilon) = 0{,}5$ bei $\varepsilon = \mu$ (chemisches Potential).

Beispiel **Cu**

n	$8{,}5 \times 10^{22}\ cm^{-3}$
k_F ($10^{10}\ m^{-1}$)	1,35 ($\approx 2\ \pi/a$)
v_F ($10^5\ m/s$)	15,6 ($\approx 0.05\ c$)
E_F (eV)	7,0
T_F (K)	82000 ($\approx 13\ T_{Sonne}$)

T_F ist nicht die Temperatur des Elektronengases



Fermi–Verteilung

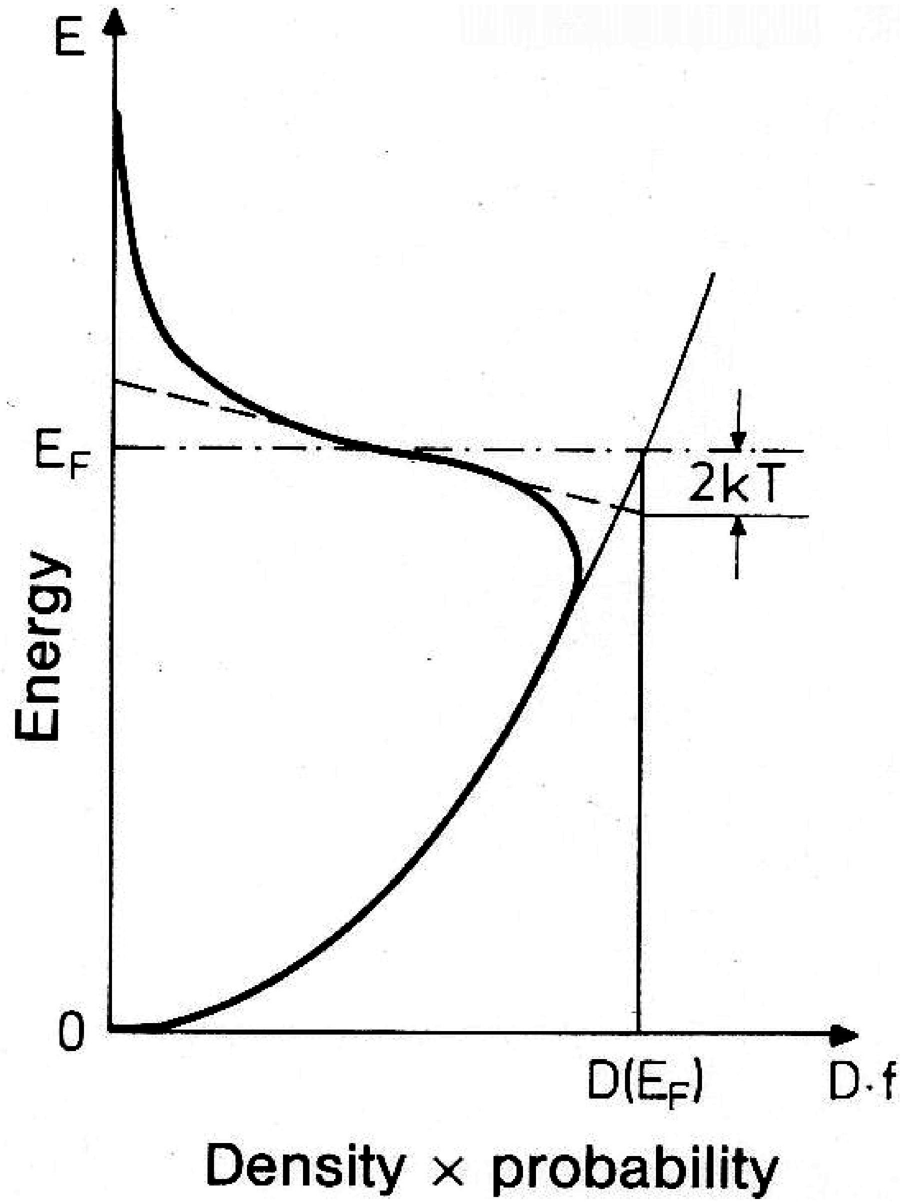
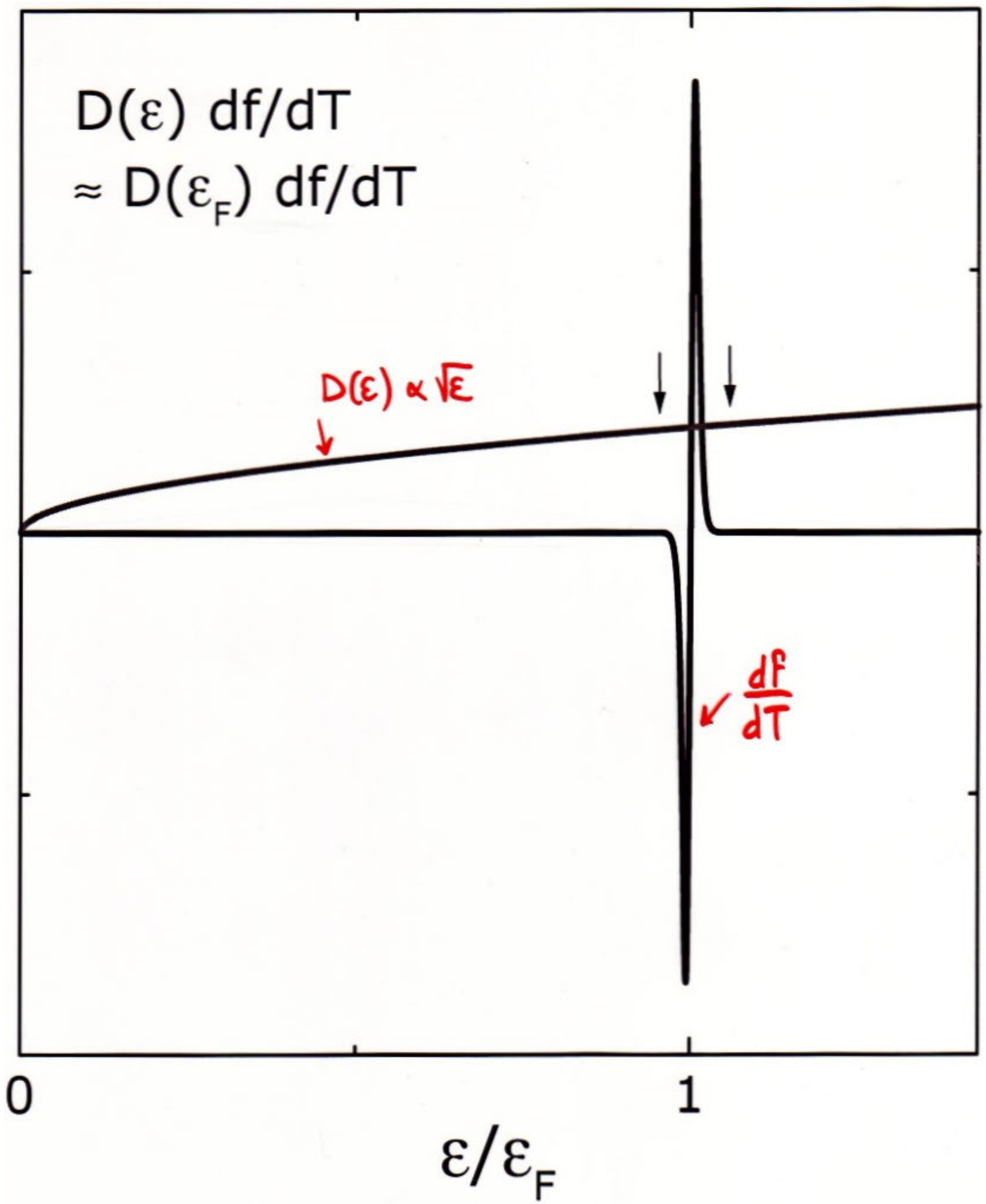


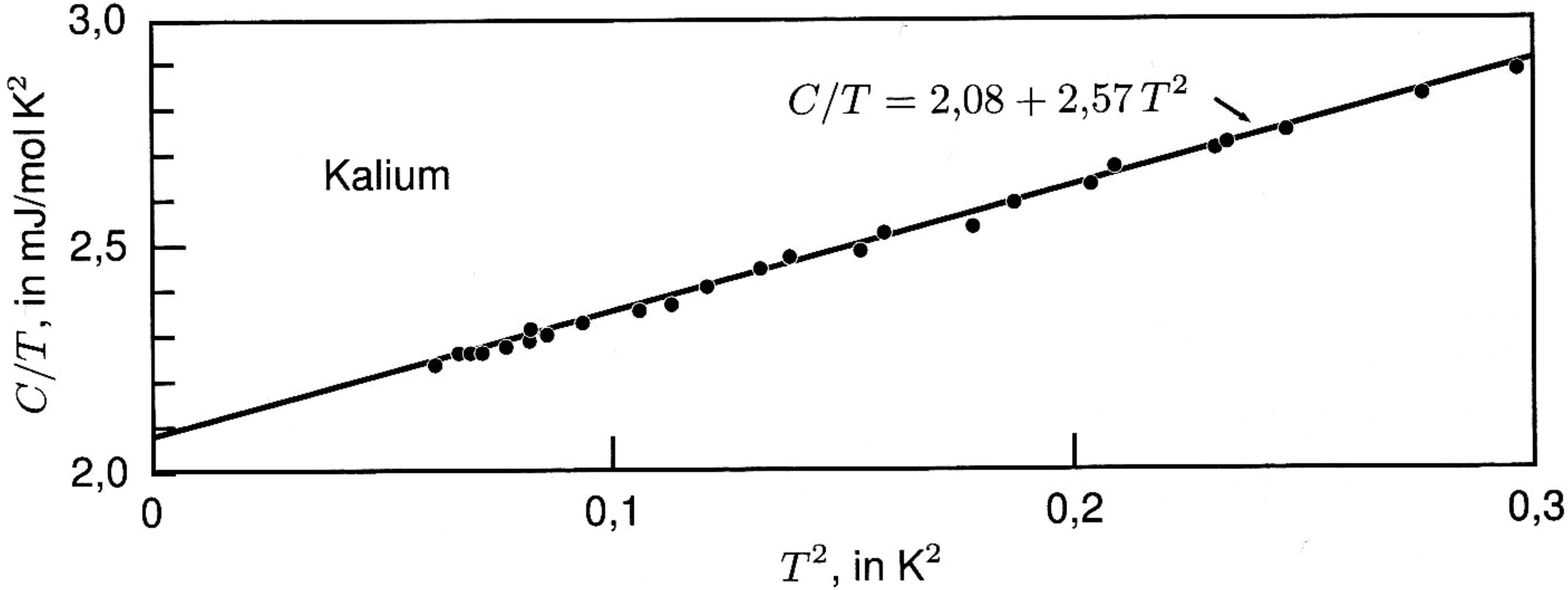
Fig. 6.7. Explanation of the specific heat capacity of quasi-free metal electrons. The effect of raising the temperature from 0 K to T is to allow electrons from $\leq 2kT$ below the Fermi energy to be promoted to $\leq 2kT$ above E_F. The tangent (– – –) intersects the energy axis at $E_F + 2kT$

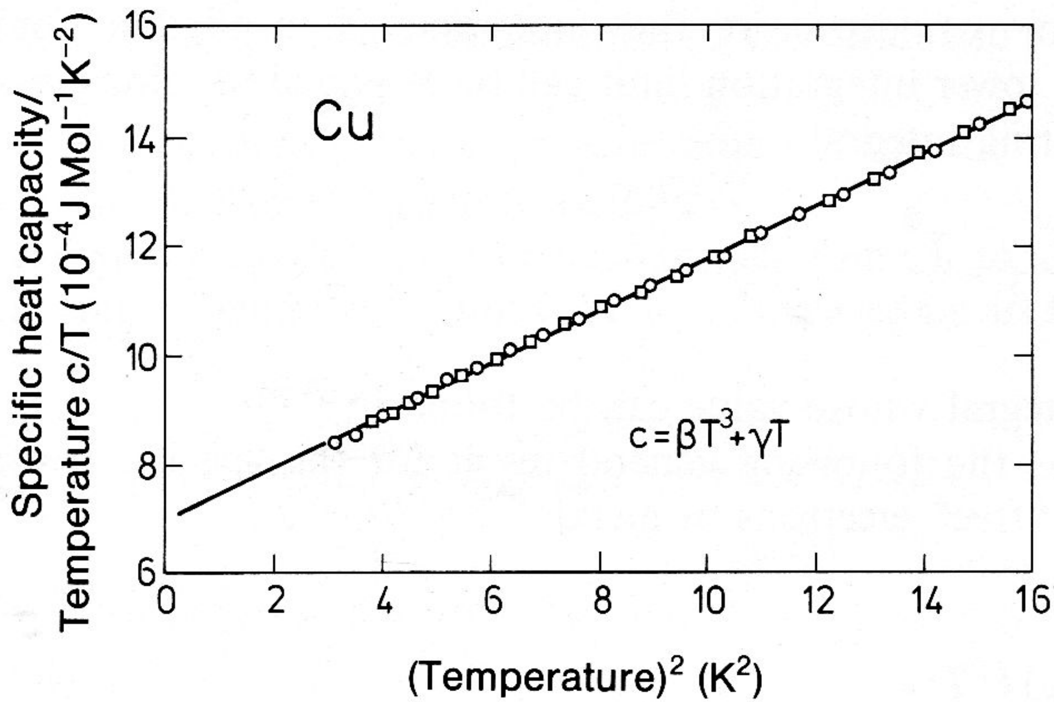


T_F = 80000 K

T = 300 K

Wärmekapazität von Metallen





Electronic specific heat: Experiment vs free-electron-model

$C_V = \gamma T + \beta T^3$

Metal	$\boldsymbol{\gamma_{exp}}$ (10^{-3} J/Mol K^2)	$\boldsymbol{\gamma_{exp}/\gamma_{theo}}$
K	2.0	1.1
Ag	0.66	1.02
Cu	0.69	1.37
Na	1.7	1.5
Al	1.35	1.6
Li	1.7	2.3
Fe	4.98	10.0
Co	4.98	10.3
Ni	7.02	15.3

3

Nur elektronischer Anteil:

$C_V \sim DOS(E_F)$ $DOS(E_F) = 3/2\ N/E_F$ $E_F = hquer^2/2\ (3\ \pi^2\ N/V)\ 1/m$

- $C_V \sim m$
- definiere m^* 'specific heat effective mass'
- $\gamma_{exp}/\gamma_{theo} = m^*/m$

Metall	$\boldsymbol{\gamma_{exp}/\gamma_{theo} = m^*/m}$	
K	1.1	
Ag	1.02	
Cu	1.37	
Na	1.5	
Al	1.6	
Li	2.3	
Fe	10.0	*d-Metall*
Co	10.3	*d-Metall*
Ni	15.3	*d-Metall*
Heavy Fermions	~ 1000	*f-Elektronen*

Elevated DOS at E_F: Free-electron-model fails

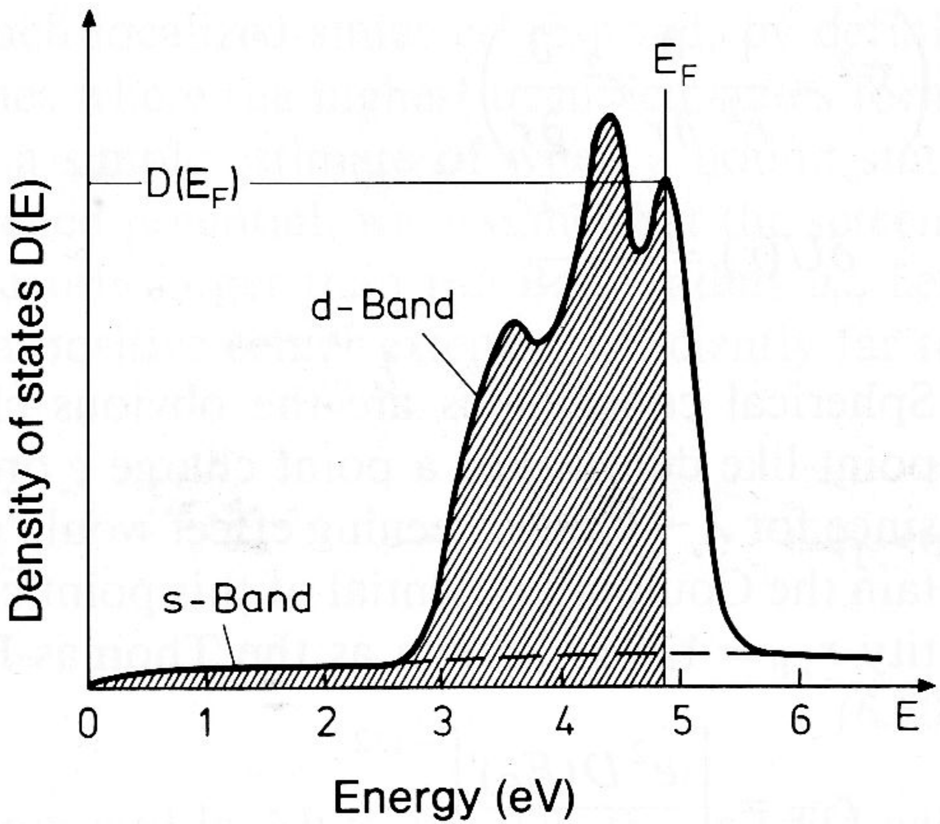
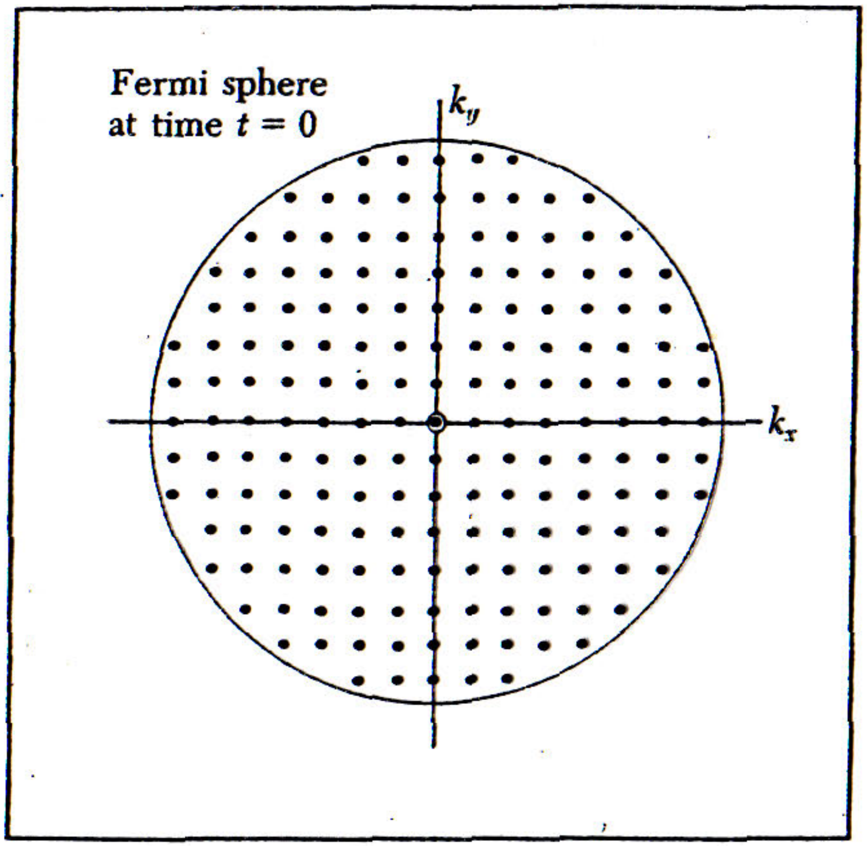
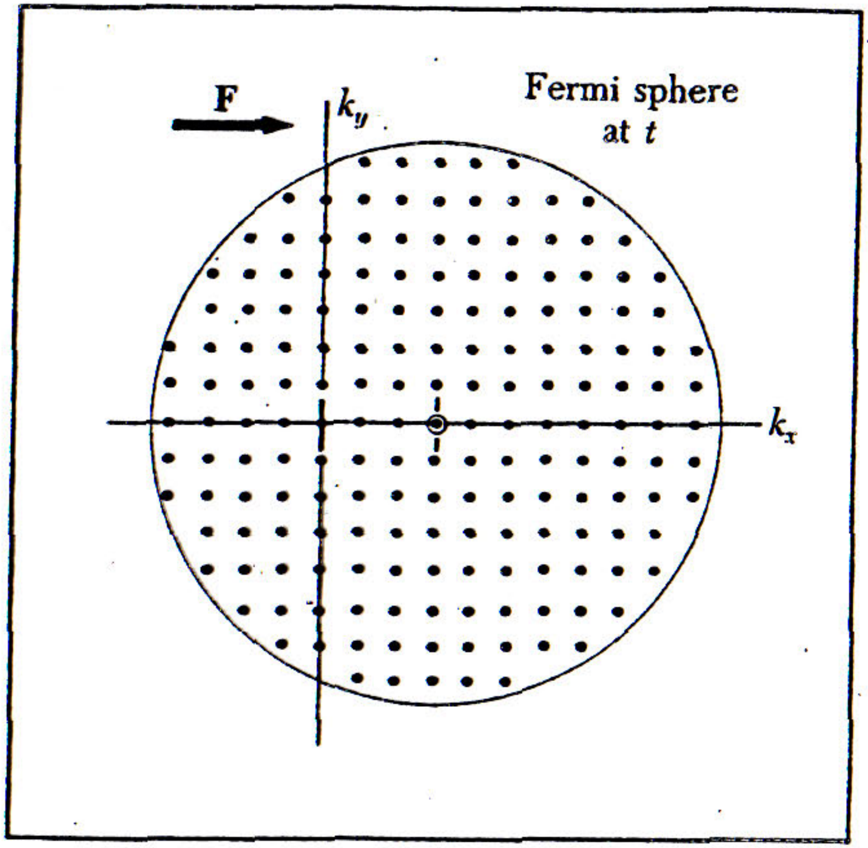


Fig. 6.9. Qualitative behavior of the density of states $D(E)$ for the conduction band of a transition metal. The strong contribution of the *d*-electrons in the vicinity of the Fermi level lies on top of that of the *s*-band (*partially dashed*)

Displacement of Fermi sphere

4a

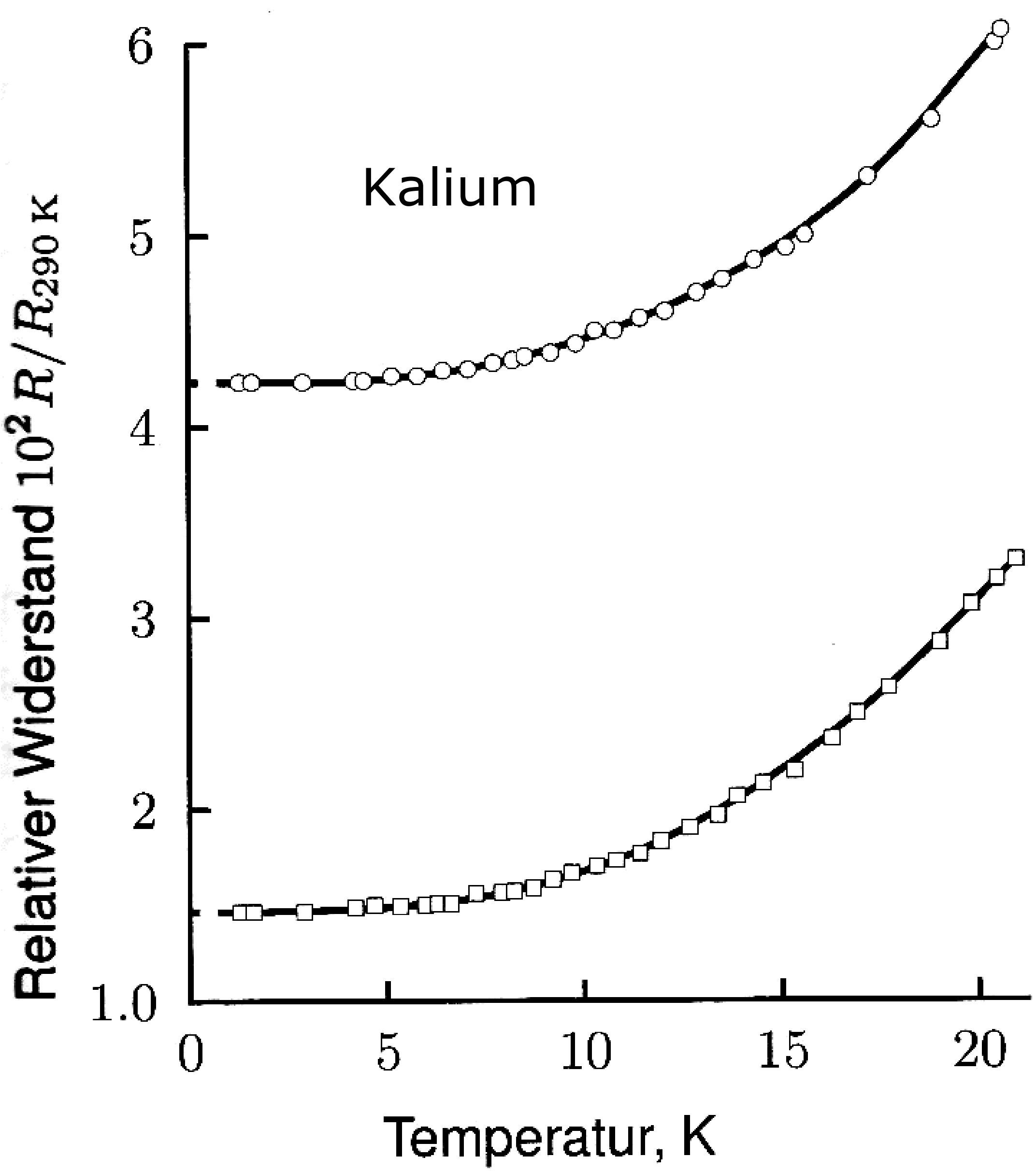




Temperaturabhängigkeit des Widerstands

4b

'Reibung' im Sommerfeldmodell?



Defekte & Phononen

Bei tiefen T:

$$\rho = \frac{1}{\sigma} = A + BT^5$$

Defekte Phononen

Widerstand zweier Kalium Proben.

(D.K.C. MacDonald und K. Mendelsohn)

Restwiderstände bei T $\rightarrow$ 0K zeigen unterschiedliche Defektkonzentrationen an.

Thermische Leitfähigkeit κ des freien Elektronengases

Erinnerung an Phononen: $\kappa = \frac{1}{3} c_V v \lambda$

verwende $c_{el} = \frac{1}{2} \pi^2 n k_B \frac{T}{T_F}$

und $E_F = \frac{1}{2} m v_F^2$

gibt: $\kappa_{el} = \frac{\pi^2}{3} \frac{n k_B^2 T}{m v_F^2} v_F \lambda = \frac{\pi^2}{3m} k_B^2 T \tau \qquad \tau = \frac{\lambda}{v_F}$

Werte einsetzten, Resultat: $\kappa_{el} \gg \kappa_{ph}$

Wiedemann-Franz-Gesetz

$$\frac{\kappa_{el}}{\sigma} = \frac{\pi^2 n k_B^2 T \tau / 3m}{n e^2 \tau / m} = \frac{\pi^2}{3}\left(\frac{k_B}{e}\right)^2 T = LT$$

Lorenzzahl $L = \frac{\kappa}{\sigma T} = 2{,}45 \cdot 10^{-8} \frac{W\Omega}{K^2}$

L · 10^8 WΩ/K^2

	0°C	100°C
Ag	2,31	2,37
Au	2,35	2,40
Cd	2,42	2,43
Cu	2,23	2,33
Mo	2,61	2,79
Pb	2,47	2,56
Pt	2,51	2,60
Sn	2,52	2,49
W	3,04	3,20
Zn	2,31	2,33

Zusammenfassung: Transportgrößen κ, σ

Drude: Klassisches Gas, Maxwell-Boltzmann-Verteilung

$$f_{MB}(v) = n\left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right)^{3/2} \exp\left(\frac{-mv^2}{2k_B T}\right)$$

Sommerfeld: Fermigas, Fermiverteilung

$$f_F(v) = 2\left(\frac{m}{h}\right)^3 \left(\exp\left(\frac{\frac{1}{2}mv^2 - \mu}{k_B T}\right) + 1\right)^{-1}$$

AC, DC Leitfähigkeit: *f* irrelevant!

$$\kappa = \frac{1}{3} v^2 \tau c_V$$

c_V verändert um ~ $k_B T/E_F$

v^2 nicht mehr $k_B T/m$ sondern 2 E_F/m, gibt Faktor $E_F/k_B T$

folglich: κ unverändert.

Also: c_V-Problem gelöst, κ & σ immer noch OK

Sommerfeld: Offene Fragen

- $R_H = - 1/ne$

  aber: T, B-abhängig, Vorzeichenwechsel
- Magnetwiderstand nicht Null
- σ_{DC}: T-abhängig
- linearer c_V Term: Potenz OK,

  aber Zahlenwerte falsch für Edel- & Ü.metalle

- Was bestimmt Zahl der Leitungselektronen?
- Warum gibt es Isolatoren?

  B isoliert, Al leitet - gleiche Gruppe des PSE

Grundannahmen des Sommerfeldmodells

(1) Freie Elektronen

Ionen bewirken lediglich Ladungsneutralität

keine WW mit Elektronen

(2) Unabhängige Elektronen

keine e-e WW

(3) Relaxationszeitnäherung

Stoßresultat unabhängig von Impulsen vor Stoß

Hauptproblem (für's Erste): (1)