

2.5 Dielektrische Eigenschaften des Elektronengases

Im folgenden betrachten wir die Reaktion des Elektronengases auf ein äußeres elektrisches Feld \vec{E} .

Diese wird beschrieben durch die **dielektrische Funktion** $\varepsilon(\omega, \vec{K})$.

Die dielektrische Funktion (auch: relative Permeabilität) ist über den Zusammenhang von elektrischem Feld \vec{E} und der Polarisation \vec{P} (= Dichte der elektrischen Dipolmomente) definiert.

Es gilt:

$$\vec{D} = \varepsilon_0 \vec{E} + \vec{P} = \varepsilon \varepsilon_0 \vec{E} \quad . \quad (2.52)$$

Der Zusammenhang dielektrische Verschiebung \vec{D} vs. äußere Ladungsdichte ϱ_{ext} ist analog zum Zusammenhang elektrisches Feld \vec{E} vs. gesamte Ladungsdichte $\varrho = \varrho_{ext} + \varrho_{ind}$, d.h.

$$\operatorname{div} \vec{D} = \operatorname{div} \varepsilon \varepsilon_0 \vec{E} = \varrho_{ext} \quad (2.53)$$

$$\operatorname{div} \vec{E} = \frac{\varrho}{\varepsilon_0} = \frac{\varrho_{ext} + \varrho_{ind}}{\varepsilon_0} \quad (2.54)$$

Beziehungen für Fourier-Komponenten von \vec{D} , \vec{E} , ϱ und elektrost. Potential φ :¹

Mit der Definition

$$\vec{D}(\vec{K}) = \varepsilon(\vec{K}) \varepsilon_0 \cdot \vec{E}(\vec{K}) \quad (2.55)$$

wird (2.54) zu

$$\operatorname{div} \vec{E} = \operatorname{div} \sum \vec{E}(\vec{K}) e^{i\vec{K}\cdot\vec{r}} = \frac{1}{\varepsilon_0} \sum \varrho(\vec{K}) e^{i\vec{K}\cdot\vec{r}} \quad (2.56)$$

und (2.53) zu

$$\operatorname{div} \vec{D} = \operatorname{div} \sum \varepsilon(\vec{K}) \varepsilon_0 \vec{E}(\vec{K}) e^{i\vec{K}\cdot\vec{r}} = \sum \varrho_{ext}(\vec{K}) e^{i\vec{K}\cdot\vec{r}} \quad (2.57)$$

Jede dieser Gleichungen muß für jeden einzelnen Summanden erfüllt sein.

Durch Division folgt

$$\varepsilon(\vec{K}) = \frac{\varrho_{ext}(\vec{K})}{\varrho(\vec{K})} = 1 - \frac{\varrho_{ind}(\vec{K})}{\varrho(\vec{K})} \quad (2.58)$$

Das elektrostatische Potential φ_{ext} , definiert durch $-\nabla \varphi_{ext} = \vec{D}$, erfüllt die Poisson-Gleichung $\Delta \varphi_{ext} = -\varrho_{ext}/\varepsilon_0$.

Analog gilt für das Potential φ , definiert durch $-\nabla \varphi = \vec{E}$, die Beziehung $\Delta \varphi = -\varrho/\varepsilon_0$.

⇒ für die Fourier-Komponenten der Potentiale gilt [mit (2.58)]

$$\frac{\varphi_{ext}(\vec{K})}{\varphi(\vec{K})} = \frac{\varrho_{ext}(\vec{K})}{\varrho(\vec{K})} = \varepsilon(\vec{K}) \quad . \quad (2.59)$$

¹zur Vereinfachung ohne Frequenzabhängigkeit

Wegen ausgeprägter Abhängigkeit von Frequenz ω und Wellenvektor \vec{K} bestimmt die dielektrische Funktion $\varepsilon(\omega, \vec{K})$ ganz wesentlich die physikalischen Eigenschaften von Festkörpern.

Zwei wichtige Grenzfälle:

- $\vec{K} \rightarrow 0 \Rightarrow \varepsilon(\omega, \vec{K} = 0) \equiv \varepsilon(\omega)$
beschreibt **Plasmaschwingungen**, d.h. kollektive Anregungen (Schwingungen) des Fermi-Sees (Elektronengases) relativ zum Gitter
 \rightarrow *Volumen- und Oberflächenplasmonen*
- $\omega \rightarrow 0 \Rightarrow \varepsilon(\omega = 0, \vec{K}) \equiv \varepsilon(\vec{K})$
beschreibt die **elektrostatische Abschirmung** der $(e^- - e^-)$ -WW, der $(e^-$ -Gitter)-WW und der $(e^-$ -Fremdatom)-WW im Kristall.

2.5.1 Plasmaschwingungen

Ein **Plasma** ist ein Medium mit gleicher Konzentration von positiven und negativen Ladungsträgern – zumindest ein Ladungsträgertyp muß beweglich sein.

Hier:

Festkörper mit den negativ geladenen, beweglichen Leitungselektronen (Elektronengas), die in das Gitter der positiv geladenen Ionenrümpfen eingebettet sind.

Wir betrachten das Elektronengas bei **großen Wellenlängen**, d.h. $\vec{K} = 2\pi/\lambda \rightarrow 0$ und suchen die dielektrische Funktion $\varepsilon(\omega)$.

Dazu betrachten wir die **Verschiebung** x der Koordinate eines Elektrons von der quasi-homogenen Ladungsverteilung.

Eine solche Verschiebung x induziert ein elektrisches **Dipolmoment** $p = -ex$ und damit bei Verschiebung von N Elektronen im Volumen V (also mit Dichte n) die **Polarisation** $P = -\sum_{i=1}^N ex/V = -nex$.

Die dielektrische Funktion $\varepsilon(\omega)$ erhält man aus der Bewegungsgleichung eines freien Elektrons im elektrischen Feld:

$$m\ddot{x} = -eE \quad (2.60)$$

Wir betrachten erzwungene Schwingungen mit der Zeitabhängigkeit $x(t)$, $\vec{E}(t) \propto e^{-i\omega t}$.

Dann folgt aus (2.60)

$$-\omega^2 mx = -eE; \quad \text{bzw.} \quad x = \frac{eE}{m\omega^2} \quad (2.61)$$

Daraus resultiert ein Dipolmoment $p = -ex = -e^2 E/m\omega^2$ und somit die Polarisation

$$P = -nex = -\frac{ne^2}{m\omega^2} E \quad (2.62)$$

Mit (2.52) folgt damit die dielektrische Funktion bei der Frequenz ω

$$\varepsilon(\omega) = \frac{D(\omega)}{\varepsilon_0 E(\omega)} = 1 + \frac{P(\omega)}{\varepsilon_0 E(\omega)} = 1 - \frac{ne^2}{\varepsilon_0 m\omega^2} \quad (2.63)$$

bzw.

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \quad \text{mit der Plasmafrequenz} \quad \omega_p \equiv \frac{ne^2}{\varepsilon_0 m} \quad (2.64)$$

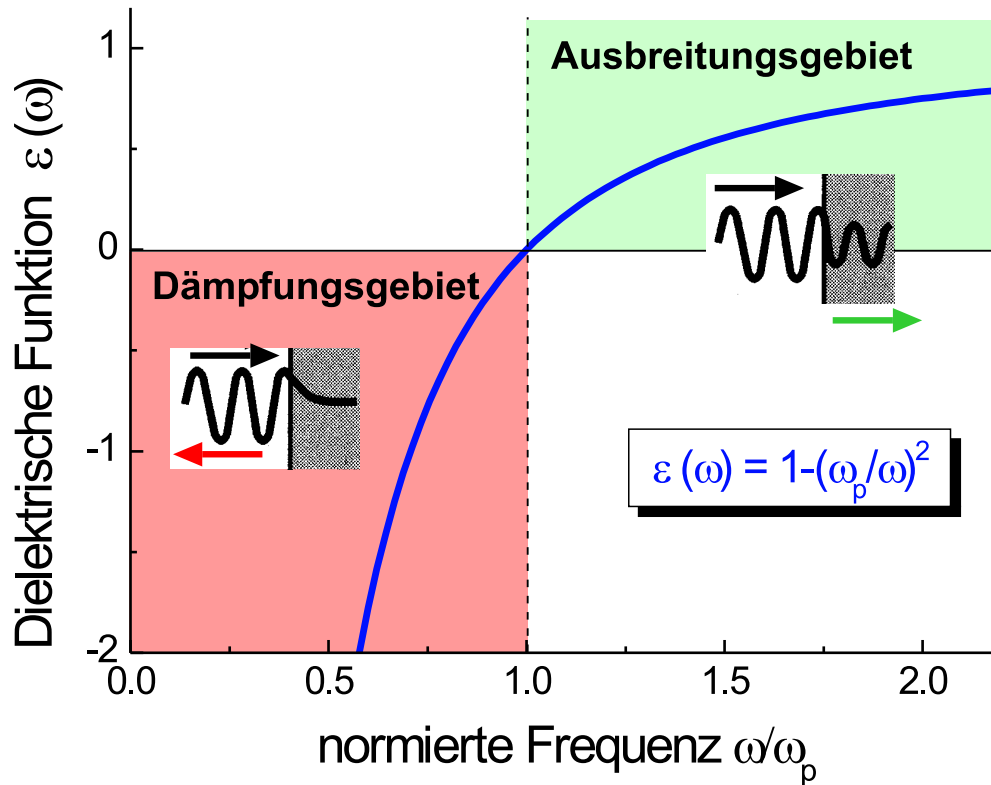


Abb. 2.33: Dielektrische Funktion $\varepsilon(\omega)$ eines freien Elektronengases, aufgetragen gegen die Frequenz in Einheiten der Plasmafrequenz ω_p . Elektromagnetische Wellen breiten sich ungedämpft aus, wenn ε reell und positiv ist. Sie werden an der Grenzfläche zu einem Medium total reflektiert, wenn dessen ε negativ ist. [nach Ch. Kittel, *Einführung in die Festkörperphysik* (1999); Abb.10.1].

Mit der Dielektrizitätskonstanten $\varepsilon(\infty)$ des Hintergrunds der positiven Gitter-Ionen (const. bis zu Frequenzen $\omega \gg \omega_p$) wird aus (2.64)

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon(\infty) \left[1 - \frac{\tilde{\omega}_p^2}{\omega^2} \right] \quad \text{mit} \quad \tilde{\omega}_p^2 = \frac{ne^2}{\varepsilon(\infty)\varepsilon_0 m} = \frac{\omega_p^2}{\varepsilon(\infty)} \quad (2.65)$$

beachte: $\varepsilon(\omega) = 0$ für $\omega = \tilde{\omega}_p$!

Dispersion für elektromagnetische Wellen

Wellengleichung in nichtmagnetischem, isotropen Medium:

$$\mu_0 \frac{\partial^2 \vec{D}}{\partial t^2} = \Delta \vec{E} \quad (2.66)$$

→ suche Lösung der Form $E \propto e^{-i\omega t} e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}}$.

Mit $D = \varepsilon(\omega, \vec{k}) \varepsilon_0 \vec{E}$ ergibt sich dann die Dispersionsrelation für elektromagnetische Wellen zu

$$\varepsilon(\omega, \vec{K}) \varepsilon_0 \mu_0 \omega^2 = \vec{K}^2 \quad (\text{SI}) \quad (2.67)$$

$$\text{bzw. } \varepsilon(\omega, \vec{K}) \omega^2 = c^2 \vec{K}^2 \quad (\text{CGS})$$

Diskussion:

- ε reell und $\varepsilon > 0$:
 - ⇒ K reell (für reelle ω)
 - ⇒ **Ausbreitung einer transversalen elektromagnetischen Welle** mit Phasengeschwindigkeit $\omega/K = c/\sqrt{\varepsilon}$
- ε reell und $\varepsilon < 0$:
 - ⇒ K imaginär (für reelle ω)
 - ⇒ Ortsabhängigkeit $E \propto e^{-|K|r}$,
 - d.h. **exponentielle Dämpfung** mit charakteristischer Abklinglänge $1/|K|$
- ε komplex:
 - ⇒ K komplex (für reelle ω)
 - ⇒ **abklingende Welle** (Abklinglänge aus inversem Imaginärteil von K)
- $\varepsilon = \infty$:

System zeigt Reaktion (endliche "induzierte Polarisation") in Abwesenheit äußerer Kräfte.

→ Pole in $\varepsilon(\omega, \vec{k})$ definieren Frequenzen **freier Schwingungen** des Mediums
- $\varepsilon = 0$:

Nur für $\varepsilon = 0$ sind **longitudinal polarisierte Wellen** möglich (s.u.).

Transversale optische Schwingungen

Mit $\varepsilon = \varepsilon_\infty \left[1 - \frac{\tilde{\omega}_p^2}{\omega^2} \right]$ aus (2.65) folgt aus der Dispersionsrelation (2.68)

$$\varepsilon(\omega)\omega^2 = \varepsilon(\infty)(\omega^2 - \tilde{\omega}_p^2) = c^2 K^2 \quad (2.68)$$

Betrachte zwei Fälle

- **niedrige Frequenzen** $\boxed{\omega < \tilde{\omega}_p}$ **negatives** $\varepsilon \Rightarrow K$ imaginär
 $\Rightarrow E \propto e^{-|K|x}$ \Rightarrow **Totalreflexion** elektromagnetischer Wellen die auf das Medium treffen.
- **hohe Frequenzen** $\boxed{\omega > \tilde{\omega}_p}$ **positives** $\varepsilon \Rightarrow K$ reell
 \Rightarrow **transparenter Kristall**

Die dielektrische Funktion $\varepsilon(\omega)$ ist positiv und reell;
dann kann man für die Dispersionsrelation schreiben:

$$\omega^2 = \tilde{\omega}_p^2 + c^2 K^2 / \varepsilon(\infty) \quad \text{bzw.} \quad \frac{\omega}{\tilde{\omega}_p} = \sqrt{1 + \frac{c^2 K^2}{\varepsilon(\infty)}} \quad (2.69)$$

Diese Gleichung beschreibt transversale elektromagnetische Wellen in einem Plasma.

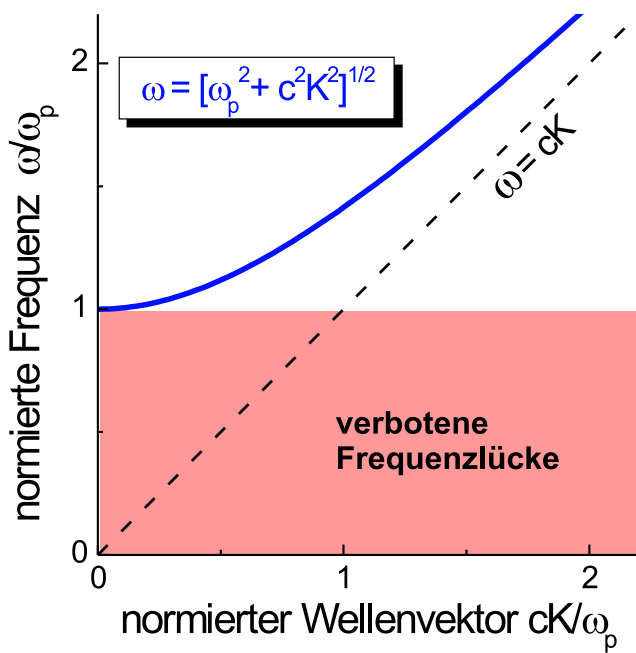


Abb. 2.34: Dispersionsrelation für transversale elektromagnetische Wellen in einem Plasma. Die Gruppengeschwindigkeit $v_g = \frac{d\omega}{dk}$ ist die Steigung der Dispersionskurve. Obwohl die dielektrische Funktion zwischen 0 und 1 liegt, ist die Gruppengeschwindigkeit kleiner als die Lichtgeschwindigkeit im Vakuum. [nach Ch. Kittel, *Einführung in die Festkörperphysik* (1999); Abb.10.2].

\Rightarrow **Plasmafrequenz = Grenzfrequenz** für Ausbreitung transversaler el.mag. Wellen.

Dieser entspricht die Grenzwellenlänge $\lambda_p \equiv \frac{2\pi c}{\omega_p}$.

\rightarrow eine Welle kann sich ausbreiten, wenn ihre Wellenlänge (im freien Raum) kleiner ist als λ_p , andernfalls wird sie reflektiert.

Zahlenbeispiele:

n [cm^{-3}]	10^{22}	10^{18}	10^{14}	10^{10}
ω_p	5700 THz	57 THz	570 GHz	5.7 GHz
λ_p	0.33 μm	33 μm	3.3 mm	33 cm

⇒ **Transparenz von Alkalimetallen im UV**

typische Ladungsträgerdichte $\sim 10^{22} \text{cm}^{-3} \Leftrightarrow \lambda_p \approx 330 \text{ nm}$

⇒ für sichtbares Licht ($\lambda > 400 \text{ nm}$): Reflexion
für UV-Licht (kleineres λ): Transmission

λ_p in nm	Li	Na	K	Rb	Cs
berechnet	155	209	287	322	362
experimentell	155	210	315	340	–

Tabelle 2.3: Grenzwerte für die Transmission im Ultravioletten für Alkalimetalle, [nach Ch. Kittel, *Einführung in die Festkörperphysik* (1999); Tab.10.1]

Anmerkungen:

1. Lichtreflexion an Metall ist ähnlich zu Reflexion von Radiowellen an Ionosphäre: freie e^- der Ionosphäre machen ε bei niedrigen Frequenzen negativ.
Aber:
 - n und damit ω_p ist wesentlich kleiner als in Metallen;
 - ω_p liegt aber noch oberhalb der Radiofrequenzen
⇒ Reflexion von Radiowellen.
2. Plasmakante ist auch bei Halbleitern beobachtbar
– wegen geringerer Ladungsträgerdichte bei niedrigeren Frequenzen.
Bsp.: InSb mit Absorptionskante im Infraroten

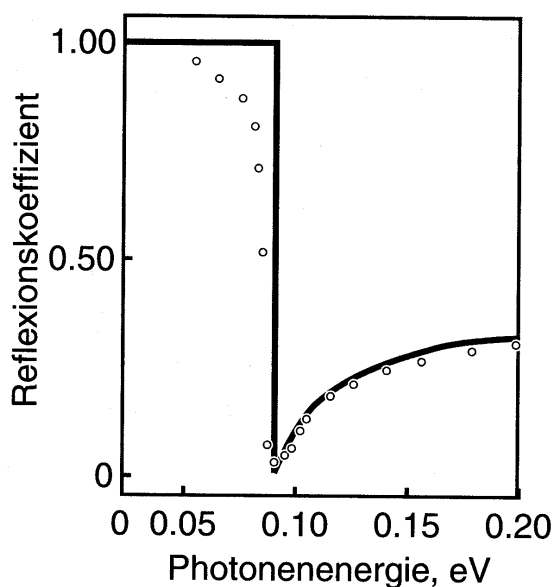


Abb. 2.35: Reflexionskoeffizient für Indiumantimonid mit $n = 4 \cdot 10^{18} \text{cm}^{-3}$ (nach J.N. Hodgson) [aus Ch. Kittel, *Einführung in die Festkörperphysik* (1999); Abb.10.3].

Longitudinale Plasmaschwingungen

Im Fall $\varepsilon = 0$ (bei einer Frequenz ω_L) ist die Anregung einer kollektiven longitudinalen Plasmaschwingung des Elektronengases möglich (mit $\vec{K} \sim 0$).

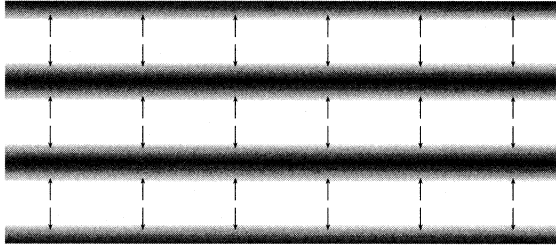


Abb. 2.36: Eine Plasmaschwingung. Die Pfeile deuten die Richtung der Verschiebung der Elektronen an. [aus Ch. Kittel, *Einführung in die Festkörperphysik* (1999); Abb.10.4].

Für $K = 0$ folgt dies direkt aus der Geometrie einer longitudinalen Polarisationswelle:
Ladungsverhältnisse bei longitudinalen Plasmaschwingungen

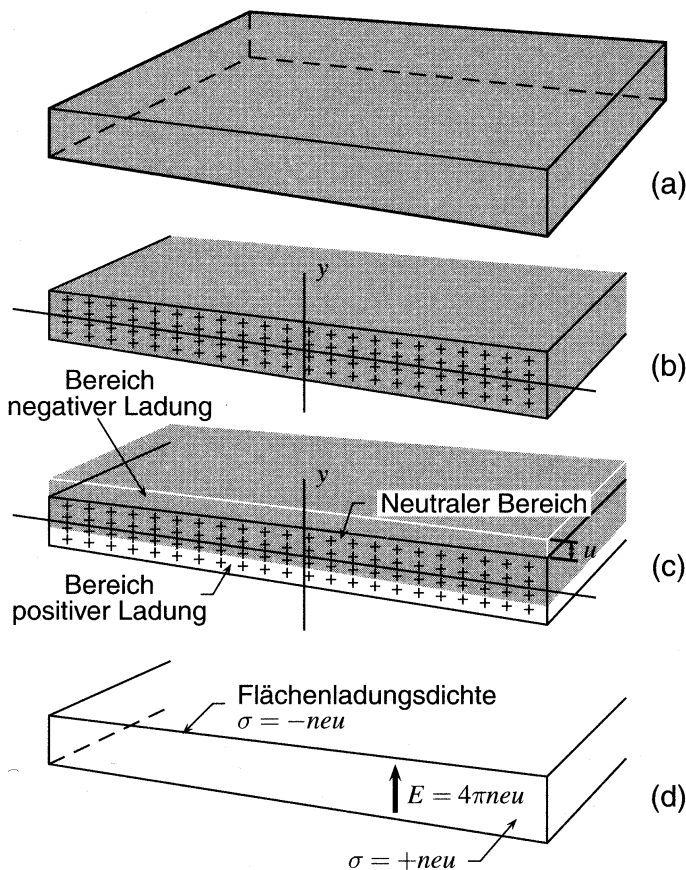


Abb. 2.37: (a) dünne Schicht eines Metalls. Ein Querschnitt ist in (b) dargestellt; die positiven Ionenrümpfe sind durch $+$ -Zeichen, der Elektronensee durch den grauen Hintergrund angedeutet. Die Schicht ist elektrisch neutral. (c) negative Ladung ist gleichmäßig um eine kleine Strecke u nach oben verschoben (übertrieben groß gezeichnet). (d) Die Verschiebung bewirkt Flächenladungsdichten σ auf der nach oben und unten zeigenden Oberfläche der Schicht und ein elektrisches Feld E im Inneren der Schicht [aus Ch. Kittel, *Einführung in die Festkörperphysik* (1999); Abb.10.5].

einheitliche Ladungsverschiebung um u

\Rightarrow Flächenladungsdichten $\pm neu$

an unterer, bzw. oberer Oberfläche in Abb.2.5.1(d); n ist die Elektronenkonzentration.

\Rightarrow Elektrisches Feld im Inneren (Depolarisationsfeld) $E = \frac{neu}{\varepsilon_0} = -\frac{P}{\varepsilon_0}$

$\Rightarrow \vec{D} = \varepsilon_0 \vec{E} + \vec{P} = 0$, bzw. mit $\vec{D} = \varepsilon \varepsilon_0 \vec{E}$ folgt $\varepsilon = 0$.

Aus der Bedingung

$$\varepsilon(\omega_L) = 0 \quad (2.70)$$

folgt mit Gl.(2.64) für die Nullstelle der dielektrischen Funktion eines Elektronengases die longitudinale Frequenz:

$$\varepsilon(\omega_L) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega_L^2} = 0 \Rightarrow \omega_L = \omega_p \quad (2.71)$$

d.h. die Frequenz ω_L der freien longitudinalen Schwingungsmode liegt gerade bei der Plasmafrequenz ω_p , also der Grenzfrequenz für transversale el.magn. Wellen.

Schwingungsgleichung:

Das Depolarisationsfeld $E = \frac{neu}{\varepsilon_0} = -\frac{P}{\varepsilon_0}$

wirkt als rückstellende Kraft auf die Elektronen

versucht den Elektronensee wieder in die Gleichgewichtslage zu bringen.

Bewegungsgleichung eines Einheitsvolumens des Elektronengases der Konzentration n

$$nm \frac{d^2 u}{dt^2} = -neE = -\frac{n^2 e^2 u}{\varepsilon_0} \quad (2.72)$$

oder

$$\frac{d^2 u}{dt^2} + \omega_p^2 u = 0 \quad \text{mit} \quad \omega_p = \left(\frac{ne^2}{m\varepsilon_0} \right) \quad (2.73)$$

ist also Bewegungsgleichung eines einfachen harmonischen Oszillators der Frequenz ω_p (Plasmafrequenz)

Ausdruck in (2.73) für ω_p ist identisch mit (2.64) – wurde dort in anderem Zusammenhang hergeleitet.

Dispersionsrelation

für $K \ll k_{\text{Fermi}}$ ergibt sich

$$\omega(K) \approx \omega_p \left(1 + \frac{3K^2 v_F^2}{10\omega_p^2} + \dots \right) \quad \begin{array}{l} \text{Dispersion} \\ \text{Plasmawellen} \end{array} \quad \begin{array}{l} \text{longitudinaler} \\ \text{Plasmawellen} \end{array} \quad (2.74)$$

Plasmonen

→ Quantisierte Plasmaschwingungen
(kollektive, longitudinale Anregung des Leitungselektronengases)

Anregung von Plasmonen:

inelastische Elektronen- od. Photonenstreuung in Metall-Filmen
(in Transmission oder Reflektion)

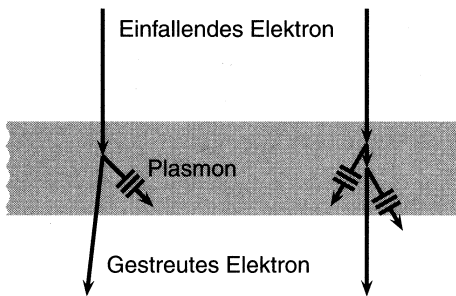


Abb. 2.38: Erzeugung von Plasmonen in einem Metallfilm durch inelastische Streuung eines Elektrons. Das einfallende Elektron hat typischerweise eine Energie von 1 bis 10 keV. Die Plasmonenenergie kann von der Größenordnung 10eV sein [aus Ch. Kittel, *Einführung in die Festkörperphysik* (1999); Abb.10.6].

Reflektiertes oder transmittiertes Elektron erfährt Energieverlust

$$\Delta\epsilon = n\hbar\omega_p \quad (n = 1, 2, \dots)$$

typisch $\hbar\omega_p \sim 10\text{ eV}$ (siehe z.B. Kittel (1999), Tab.10.2)

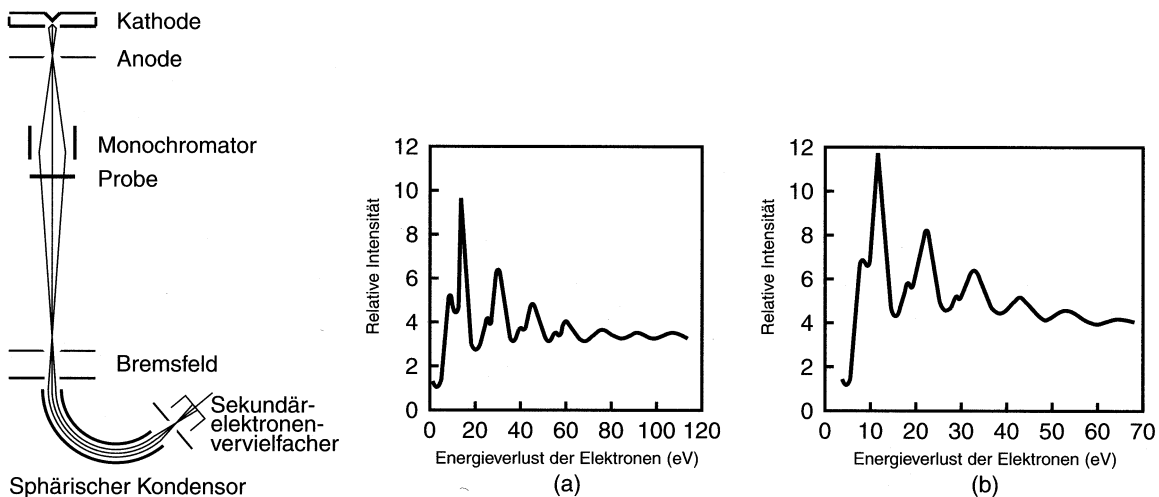


Abb. 2.39: **Links:** Ein Spektrometer mit elektrostatischem Analysator zum Studium der Plasmonenanregung durch Elektronen. **Rechts:** Energieverlustspektren von Elektronen, die von **Aluminiumfilmen** (a) und **Magnesiumfilmen** (b) reflektiert wurden. Die Primärenergie der Elektronen betrug 2020 eV. Die zwölf Verlustpeaks, die in Al beobachtet werden, setzen sich aus Kombinationen von 10,3 und 15,3 eV-Verlusten zusammen. der 10,3 eV-Verlust ist Oberflächenplasmonen und der 15,3 eV-Verlust Volumenplasmonen zuzuschreiben. Die zehn Verlustpeaks in Mg stammen von 7,1 eV-Oberflächenplasmonen und 10,6 eV-Volumenplasmonen [aus Ch. Kittel, *Einführung in die Festkörperphysik* (1999); Abb.10.7,8].

2.5.2 Elektrostatische Abschirmung

Betrachte positive Ladung, eingebettet in Elektronengas eines Metalls.

→ Ansammlung von e^- um Ladung (Polarisationswolke)
– schirmen die positive Ladung ab

⇒ Das elektrische Feld der pos. Ladung fällt schneller ab als mit $1/r^2$ ab.

Das statische Abschirmverhalten des Elektronengases kann durch die \vec{K} -Abhängigkeit der dielektrischen Funktion $\varepsilon(K)$ beschrieben werden.

Wir betrachten also im Grenzfall $\varepsilon(\omega = 0, K)$ die Reaktion der Elektronen auf ein äußeres elektrisches Feld.

Quantitativ • Elektronengas, Ladungskonzentration $-n_0e$ Sei anfänglich
 • Gitter, positive Hintergrundladung $+n_0e$ homogen

Gitter werde mechanisch deformiert:

$$\varrho^+(x) = n_0e + \underbrace{\varrho_{\text{ext}}(K) \sin Kx}_{\text{externes Feld}} \quad (2.75)$$

→ elektrostatisches Feld, wirkt auf
Elektronen wie ein externes Feld

- elektrostatisches Potential φ :
kann aus Poisson-Gleichung: $\Delta\varphi = -\frac{\varrho}{\varepsilon_0}$ gewonnen werden
(folgt aus (2.54) und $\vec{E} = -\vec{\nabla}\varphi$)
- für die positive Ladung gilt

$$\varphi = \varphi_{\text{ext}}(K) \sin Kx; \quad \varrho = \varrho_{\text{ext}}(K) \sin Kx \quad (2.76)$$

Damit liefert die Poisson-Gl.

$$\varphi_{\text{ext}}(K) = \frac{\varrho_{\text{ext}}(K)}{K^2\varepsilon_0} \quad (2.77)$$

- Elektronengas:
wird deformiert durch Überlagerung
(i) des elektrostatischen Potentials $\varphi_{\text{ext}}(K)$ (aus positiver Ladungsverteilung)
und
(ii) des (noch unbekanntes) induzierten elektrostatischen Potentials $\varphi_{\text{ind}}(K) \sin Kx$ (aus Deformation des e^- -Gases selbst)

Ladungsdichte der e^- :

$$\varrho^-(x) = -n_0e + \varrho_{\text{ind}}(K) \sin Kx \quad (2.78)$$

($\varrho_{\text{ind}}(K)$: Amplitude der im e^- -Gas induzierten Änderung der Ladungsdichte)

Gesucht: ϱ_{ind} als Funktion von $\varrho_{\text{ext}}(K)$

Gesamtes Potential:

$$\varphi(K) = \varphi_{\text{ext}}(K) + \varphi_{\text{ind}}(K)$$

Gesamte Ladung:

$$\varrho(K) = \varrho_{\text{ext}}(K) + \varrho_{\text{ind}}(K)$$

Zusammenhang über Poisson-Gl. [wie in (2.77)]:

$$\varphi(K) = \frac{\varrho(K)}{K^2 \epsilon_0} \quad (2.79)$$

• nun benötigen wir: Verknüpfung zwischen φ und e^- -Konzentration

→ **Thomas-Fermi-Näherung**

Annahme:

Man kann ein lokales, inneres chemisches Potential als Funktion der lokalen Elektronenkonzentration definieren

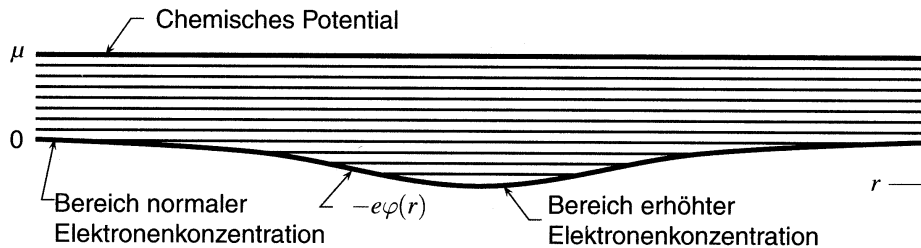


Abb. 2.40: Im thermischen und im Diffusionsgleichgewicht ist das chemische Potential konstant. Damit es konstant bleibt, erhöhen wir dort, wo die potentielle Energie klein ist, die Elektronenkonzentration; dort, wo das Potential groß ist, erniedrigen wir sie. [aus Ch. Kittel, *Einführung in die Festkörperphysik* (1999); Abb.10.9].

Das gesamte chemische Potential des e^- -Gases muß – unabhängig vom Ort – im Gleichgewicht konstant sein.

- Bereich ohne elektrostatischen Beitrag, bei $T = 0$:

$$\mu = \epsilon_F^0 = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n_0)^{\frac{2}{3}} \quad (2.80)$$

(s. Kap.0: Vorbemerkungen)

- Bereich mit $\varphi(x)$:

$$\begin{aligned} \text{const.} = \mu = \epsilon_F(x) - e\varphi(x) &\approx \frac{\hbar^2}{2m} [3\pi^2 n(x)]^{\frac{2}{3}} - e\varphi(x) \\ &\approx \frac{\hbar^2}{2m} [3\pi^2 n_0]^{\frac{2}{3}} = \epsilon_F^0 \end{aligned} \quad (2.81)$$

($\epsilon_F(x)$ ist lokaler Wert der Fermi-Energie)

gilt, falls sich φ langsam gegenüber k_F ändert ($q \ll k_F$)

Die Thomas-Fermi-Näherung besteht in der Annahme, daß sich die Funktion $\epsilon_F(n)$ (und die Energiebandstruktur) durch das Anheben, bzw. Absenken um $e\varphi(x)$ am Ort der Störung nicht ändert (wurde in (2.81) ausgenutzt).

Durch Taylor-Entwicklung für $\epsilon_F(n)$ läßt sich (2.81) umschreiben zu

$$\frac{d\epsilon_F}{dn_0} [n(x) - n_0] \approx e\varphi(x) \quad . \quad (2.82)$$

Aus (2.80) folgt

$$\frac{d\epsilon_F}{dn_0} = \frac{2\epsilon_F}{3n_0}$$

und damit

$$\underbrace{n(x) - n_0}_{-\varrho_{\text{ind}}/e} \approx \frac{3}{2} n_0 \frac{e\varphi(x)}{\epsilon_F} \quad (2.83)$$

Die linke Seite ist der induzierte Teil der e^- -Konzentration.

Die Fourier-Komponenten dieser Gleichung lauten

$$\varrho_{\text{ind}}(K) = -\frac{3}{2} n_0 \frac{e^2}{\epsilon_F} \varphi(K) \quad (2.84)$$

mit (2.79)

$$\varrho_{\text{ind}}(K) = -\left(\frac{3n_0e^2}{2\epsilon_0\epsilon_F K^2}\right) \varrho(K) = -\frac{k_s^2}{K^2} \varrho(K) \quad \text{mit} \quad k_s^2 \equiv \frac{3n_0e^2}{2\epsilon_0\epsilon_F} \quad (2.85)$$

Mit (2.58) gilt

$$\epsilon(0, K) = 1 - \frac{\varrho_{\text{ind}}(K)}{\varrho(K)} = 1 + \frac{k_s^2}{K^2} \quad \text{dielektrische Funktion nach Thomas – Fermi} \quad (2.86)$$

Anmerkung:

Dielektrische Funktion eines Elektronengases für zwei Grenzfälle lieferte

$$\epsilon(0, K) = 1 + \frac{k_s^2}{K^2}, \quad \epsilon(\omega, 0) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \quad (2.87)$$

also nicht den selben Grenzwert von $\epsilon(0, K)$ für $K \rightarrow 0$ und $\epsilon(\omega, 0)$ für $\omega \rightarrow 0$!

Korrekte Behandlung der dielektrischen Funktion in der Nähe des Ursprungs der $\omega-K$ -Ebene erforderlich²

²siehe z.B. J. Ziman, *Principles of the theory of solids*, Cambridge (1972)

Mit der Beziehung für die Zustandsdichte D des freien Elektronengases $D(\epsilon)/V = \frac{3}{2}n_0/\epsilon$ gilt

$$k_s^2 = \frac{e^2 D(\epsilon_F)}{\epsilon_0 V} \quad (2.88)$$

bzw. mit der Fermi-Energie $\epsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m}(3\pi^2 n_0^{2/3})$ und der Definition des Bohr-Radius $a_0 = 4\pi\hbar^2\epsilon_0/m e^2$ läßt sich zeigen

$$k_s^2 = \frac{m e^2}{\pi^2 \hbar^2 \epsilon_0} \underbrace{(3\pi^2 n_0)^{1/3}}_{\equiv k_F} = \frac{4}{\pi} \frac{k_F}{a_0} \approx 4 \frac{n_0^{1/3}}{a_0} \quad (2.89)$$

k_s^{-1} ist die ”**Thomas-Fermi-Abschirmlänge**“.

Sie beschreibt die charakteristische Länge über die Störungen des elektronischen Systems durch die freien Ladungsträger abgeschirmt werden.

Es gilt

$$\frac{1}{k_s} \approx 0.5 \left(\frac{n_0}{a_0^3} \right)^{-1/6} \quad (2.90)$$

Mit dem häufig verwendeten Maß für die Konzentration n_0 der Leitungselektronen

$$r_s \equiv \left(\frac{3}{4\pi n_0} \right)^{1/3} \Leftrightarrow \frac{V}{N} = \frac{1}{n_0} = \frac{4\pi}{3} r_s^3 \quad (2.91)$$

(r_s = Radius einer Kugel mit Volumen = Volumen pro Leitungselektron V/N .)
und mit dem Fermi-Wellenvektor $k_F = (3\pi^2 n_0)^{1/3}$ gilt

$$\frac{k_s^2}{k_F^2} = \frac{4}{\pi} \frac{1}{k_F a_0} = \left(\frac{16}{3\pi^2} \right)^{2/3} \left(\frac{r_s}{a_0} \right) \quad (2.92)$$

bzw.

$$k_s = 0.815 k_F \left(\frac{r_s}{a_0} \right)^{1/2} = \frac{2.95}{(r_s/a_0)^{1/2}} \cdot \frac{1}{\text{Å}} \quad (2.93)$$

Typischerweise gilt $r_s/a_0 \approx 2 \dots 3$, bzw. $\approx 3 \dots 6$ für Alkalimetalle, bis zu 10 in einigen metallischen Verbindungen; k_s ist also in Metallen von derselben Größenordnung wie k_F .

Das heißt, daß die Thomas-Fermi-Abschirmklänge $1/k_s$ von der Größenordnung der Fermi-Wellenlänge $\lambda_F = 2\pi/k_F$ ist.

Für Kupfer: $n_0 = 8.5 \cdot 10^{22} \frac{1}{\text{cm}^3} \Rightarrow \frac{1}{k_s} \approx 0.55 \text{Å}$

D.h. Störungen des elektronischen Systems werden über eine Entfernung effektiv abgeschirmt, die von derselben Größenordnung ist wie der Teilchenabstand.

Abgeschirmtes Coulomb-Potential

betrachte Punktladung q in See von Leitungselektronen

Poisson-Gl. für nicht-abgeschirmtes Coulomb-Potential lautet

$$\Delta\varphi_{ext} = -\frac{q}{\varepsilon_0}\delta(\vec{r}) \quad (2.94)$$

Für das ungestörte Potential einer Punktladung gilt

$$\varphi_{ext} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{q}{r} \quad (2.95)$$

Fourier-Integrale:

$$\delta(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{K} e^{i\vec{K}\vec{r}} \quad (2.96)$$

und

$$\varphi_{ext}(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{K} \varphi_{ext}(\vec{K}) e^{i\vec{K}\vec{r}} \quad (2.97)$$

In (2.94) eingesetzt liefert

$$K^2\varphi_{ext}(\vec{K}) = \frac{q}{\varepsilon_0} \quad (2.98)$$

Mit (2.59) $\varphi_{ext}(K)/\varphi(K) = \varrho_{ext}(K)/\varrho(K) = \varepsilon(K)$

folgt mit Hilfe der Thomas-Fermi-Näherung $\varepsilon(K) = 1 + (k_s/K)^2$

das totale (abgeschirmte) Potential

$$\varphi(K) = \frac{\varphi_{ext}(K)}{\varepsilon(K)} = \frac{K^2\varphi_{ext}(K)}{K^2\varepsilon(K)} = \frac{q}{\varepsilon_0(K^2 + k_s^2)} \quad (2.99)$$

Durch Fourier-Transformation erhalten wir dann das abgeschirmte Coulomb-Potential

$$\begin{aligned} \varphi(r) &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{K} \varphi(\vec{K}) e^{i\vec{K}\vec{r}} \\ &= \frac{q/\varepsilon_0}{(2\pi)^3} \int_0^\infty dK \frac{2\pi K^2}{K^2 + k_s^2} \int_{-1}^1 d(\cos\theta) e^{iKr\cos\theta} \\ &= \frac{q}{2\pi^2\varepsilon_0 r} \int_0^\infty dK \frac{K \sin Kr}{K^2 + k_s^2} \\ &= \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{q}{r} \cdot e^{-k_s r} \end{aligned} \quad (2.100)$$

Der Faktor $\exp(-k_s r)$ verkleinert also die Reichweite des Coulomb-Potentials.

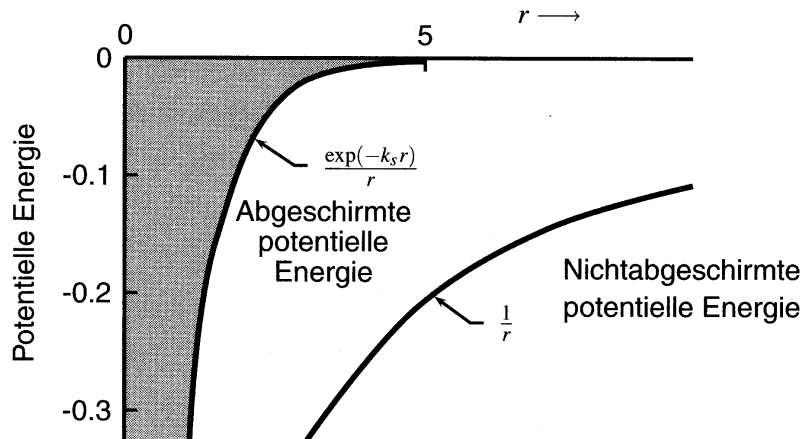


Abb. 2.41: Vergleich des abgeschirmten mit dem nicht abgeschirmten Potential einer positiven Einheitsladung gegenüber einem Elektron. Die Abschirmlänge k_s^{-1} wurde gleich Eins gesetzt [aus Ch. Kittel, *Einführung in die Festkörperphysik* (1999); Abb.10.10a].

Da die Abschirmlänge $1/k_s \propto n_0^{-1/6}$ erhält man mit geringerer Ladungsträgerkonzentration n_0 eine größere Abschirmlänge (schwächere Abschirmung).

Vakuumgrenzfall $n_0 \rightarrow 0$:

$1/k_s \rightarrow \infty$, also $\exp(-k_s r) \rightarrow 1 \Rightarrow$ ungeschirmtes Potential $\varphi \propto 1/r$

Anwendung: Berechnung des elektrischen (Rest-)Widerstands von Legierungen

Z.B. Kupfer (1-wertig) mit Zn, Ga, Ge, As (2-, 3-, 4-, 5-wertig)

Ersetzen von Cu-Atom durch Zn, Ga, Ge od. As

\Rightarrow Überschussladung (1,2,3 od.4)

wenn alle Valenzelektronen in LB des Wirtsmetalls übergehen.

Elektrischer Widerstand (Restwiderstand bei tiefen T) durch

Streuung der Leitungselektronen an Fremdatomen

\rightarrow Beschreibung der WW durch **abgeschirmtes Coulomb-Potential**

\Rightarrow Berechnete Zunahme des Restwiderstands durch Verunreinigungen in guter Übereinstimmung mit Experimenten.

Abschirmung und Phononen in Metallen

Wir betrachten eine Anwendung der *beiden* Grenzfälle der dielektrischen Funktion: longitudinale, akustische Phononen

⇒ die gesamte dielektrische Funktion (Ionen + Elektronen) muß Null sein (2.70).

Annahme:

Schallgeschwindigkeit $v_{\text{Schall}} \ll v_{\text{Fermi}}$ (d.h. $K \ll k_F$)

⇒ Thomas-Fermi-Näherung für Elektronen gerechtfertigt

$$\varepsilon_{el}(0, K) = 1 + \frac{k_s^2}{K^2} \quad (2.101)$$

Verwende für Ionen (Masse M) den Plasmonen-Grenzwert

$$\varepsilon(\omega, 0) = 1 - \frac{ne^2}{\varepsilon_0 M \omega^2} \quad (2.102)$$

(Annahme: genügend großer Abstand der Ionen untereinander
→ bewegen sich unabhängig voneinander)

Dann folgt für die gesamte dielektrische Funktion
(unter Vernachlässigung der Polarisierbarkeit der Ionenrümpfe)

$$\varepsilon(\omega, K) = 1 - \frac{ne^2}{\varepsilon_0 M \omega^2} + \frac{k_s^2}{K^2} \quad (2.103)$$

Kleine K , ω : vernachlässige "1"

→ an Nullstelle von $\varepsilon(\omega, K)$ gilt [mit $\frac{ne^2}{\varepsilon_0 k_s^2} = \frac{2}{3}\epsilon_F$ aus (2.88) und $\epsilon_F = mv_F^2/2$]

$$\omega^2 = \frac{ne^2}{\varepsilon_0 M k_s^2} K^2 = \frac{2}{3}\epsilon_F \frac{1}{M} K^2 = \frac{m}{3M} v_F^2 K^2 \quad (2.104)$$

$$\Leftrightarrow \omega = v \cdot K, \quad \text{mit Schallgeschwindigkeit } v \equiv \sqrt{\frac{m}{3M}} \cdot v_F \quad (2.105)$$

Diese Beziehung beschreibt longitudinale akustische Phononen mit großer Wellenlänge.

Paßt gut für Alkalimetalle.

Beispiel Kalium:

$v = 1.8 \cdot 10^5 \frac{\text{cm}}{\text{s}}$ aus (2.105) berechnet;
 $v = 2.2 \cdot 10^5 \frac{\text{cm}}{\text{s}}$ gemessener Wert der Schallgeschwindigkeit
 (bei 4.2 K; in [100]-Richtung).

Wechselwirkung zwischen Elektronen

- | | | |
|---|------------------------------|---|
| <p>• Fermi-Gas
(System nicht-wechselwirkender Fermionen)</p> | $e^- - e^- \xrightarrow{WW}$ | <p>Fermiflüssigkeit
(System wechselwirkender Fermionen)</p> <p>WW infolge</p> <p>(i) elektrostatische WW der LE $\rightarrow e^- - e^-$-Stöße</p> <p>(ii) bewegtes $e^- \rightarrow$ träge Reaktion des e^--Gases
\Rightarrow erhöhte effektive Masse
($\sim 25\%$ in Alkalimetallen)</p> |
|---|------------------------------|---|

Die Auswirkungen der Elektron-Elektron-WW werden üblicherweise im Rahmen der "**Landau Theorie der Fermiflüssigkeit**"³ beschrieben.

Liefert gute Beschreibung von niedrig liegenden **Einteilchen-Anregungen** eines Systems wechselwirkender Elektronen = **Quasiteilchen**

anschaulich: $e^- +$ "Verzerrungs-Wolke" im e^- -Gas

- überraschende Eigenschaft von Metallen:

mittlere freie Weglänge für $e^- - e^-$ -Stöße	\leftrightarrow	mittlerer Abstand
$\gtrsim 1 \mu\text{m}$ (300K),		der Leitungselektronen
$\gtrsim 10 \text{ cm}$ (1K),		nur wenige Å!

(Deshalb funktioniert das Bild freier Elektronen)

Gründe

(a) elektrostatische Abschirmung

Stöße zwischen Elektronen werden beschrieben durch Rutherfordsche Streugleichung

\Rightarrow Streuquerschnitt σ_0 für unabgeschirmtes Coulomb-Potential.

Aufgrund der elektrostatischen Abschirmung hat die $e^- - e^-$ -Wechselwirkung jedoch eine deutlich reduzierte Reichweite $\sim k_s^{-1}$ nach (2.88).

\Rightarrow **Reduktion des Streuquerschnitts**

Numerische Berechnungen \rightarrow Streuquerschnitt $\sigma \sim 10^{-15} \text{ cm}^2 = 10 \text{ Å}^2$
in typischen Metallen

³L. Landau, *Theory of a Fermi liquid*, Sov. Phys. JETP **3**, 920 (1957); L. Landau, *Oscillations in a Fermi liquid*, Sov. Phys. JETP **5**, 10 (1957); s.a. D. Pines und P. Nozieres, *Theory of quantum liquids*, Benjamin, 1966, Bd.I

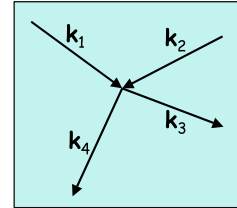
(b) Pauli-Prinzip

Betrachte 2-Körper-Stoß (freie Elektronen)

$$1 + 2 \rightarrow 3 + 4$$

mit Anfangs-Wellenvektoren \vec{k}_1 und \vec{k}_2 und \vec{k}_3 und \vec{k}_4 nach dem Stoß.

(Der Zustand i besitzt die Energie ϵ_i bezogen auf das Fermi-Niveau ϵ_F)



Pauli-Prinzip:

Endzustände 3 und 4 müssen vor dem Stoß unbesetzt sein $\Rightarrow \epsilon_3, \epsilon_4 > 0$

Sei Ausgangszustand 1 ein angeregter Zustand ($\epsilon_1 > 0$)

\rightarrow wegen Energieerhaltung muss für Ausgangszustand 2 gelten [s. Abb.2.42(a)]

$$|\epsilon_2| < \epsilon_1 \tag{2.106}$$

\Rightarrow Zustand 2 muss innerhalb Schale der Dicke ϵ_1 unter der Fermi-Fläche liegen (nur e^- nahe Fermi-Oberfläche stoßen).

Ist z.B. für Situation in Abb.2.42(b) nicht gegeben, obwohl hier Energie- und Impulserhaltung gelten würde \rightarrow beide Endzustände sind besetzt.

\Rightarrow reduziert Zahl der möglichen Anfangszustände 2 um Faktor ϵ_F/ϵ_1

Selbst wenn obige Bedingung (2.106) erfüllt ist, folgt aus den Erhaltungssätzen zusammen mit dem Pauli-Prinzip eine weitere Einschränkung für die möglichen Endzustände 3 und 4 (s. Abb.2.42(c)) \rightarrow wieder um Faktor ϵ_F/ϵ_1

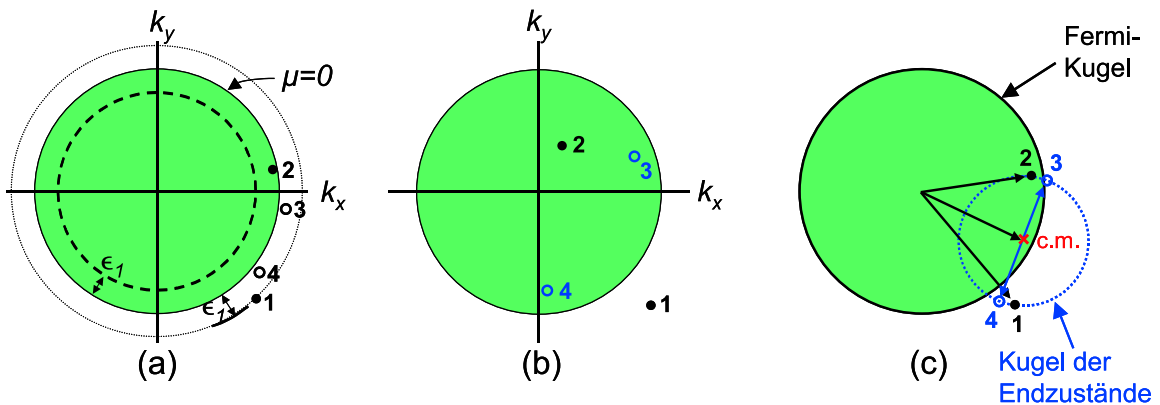


Abb. 2.42: 2-Körperstoß (freie Elektronen): (a) angeregtes Anfangsniveau 1 (Energie $\epsilon_1 > 0$) und besetztes Anfangsniveau 2 (Energie ϵ_2 aus Schale $-\epsilon_1 < \epsilon_2 < 0$); Endniveaus 3 und 4 sind anfänglich unbesetzt ($\epsilon_{3,4} > 0$); (b) mit den hier eingezeichneten Anfangszuständen 1 und 2 sind (wegen Energieerhaltung) keine unbesetzten Endniveaus möglich; die hier eingezeichneten Endniveaus würden Energie- und Impulserhaltung erfüllen, sind jedoch besetzt; (c) mit \times ist der Wellenvektor des Massenschwerpunkts (c.m.) $\vec{K}_{1,2} = (\vec{k}_1 + \vec{k}_2)/2$ bezeichnet. Alle Paare 3,4 erfüllen Energie- und Impulserhaltung, wenn sie an entgegengesetzten Enden der kleinen Kugel (Mittelpunkt $\vec{K}_{1,2}$, Durchmesser $|\vec{k}_1 - \vec{k}_2|$) liegen. Aufgrund des Pauli-Prinzips sind jedoch nur Paare 3 und 4 außerhalb der Fermi-Kugel erlaubt [nach Ch. Kittel, *Einführung in die Festkörperphysik* (1999); Abb.10.18].

Bei thermischer Verteilung der Elektronen: $\epsilon_1 \sim k_B T$

⇒ Reduzierung des Stoßquerschnitts um den Faktor

$$\frac{\sigma}{\sigma_0} \sim \left(\frac{k_B T}{\epsilon_F} \right)^2 = \left(\frac{T}{T_F} \right)^2 \sim \begin{cases} 4 \cdot 10^{-5} & (300\text{K}) \\ 4 \cdot 10^{-10} & (1\text{K}) \end{cases} \quad (2.107)$$

(mit $T_F \equiv \epsilon_F/k_B \sim 5 \cdot 10^4 \text{ K}$)

bei R.T.:

effektiver Streuquerschnitt $\sigma \approx 4 \cdot 10^{-5} \cdot 10^{-15} \text{ cm}^2 = 4 \cdot 10^{-20} \text{ cm}^2$
(inkl. Abschirmung und Pauli-Prinzip)

⇒ mittlere freie Weglänge (mit $n \approx 5 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$):

$$l \approx \frac{1}{n\sigma} \sim 5 \mu\text{m} (300 \text{ K}) \gg l_{e^- - \text{Phonon}}$$

→ bei 300 K dominieren Stöße mit Phononen

bei tiefen Temperaturen ($\sim 4.2 \text{ K}$):

für eine Reihe von Metallen wird für den elektrischen Widerstand $R \propto T^2$ beobachtet;

ist konsistent mit der T -Abhängigkeit des e^-e^- -Streuquerschnitts (2.107).

→ e^-e^- -Stöße können einen wesentlichen Beitrag zur T -Abhängigkeit des elektrischen Widerstands liefern.

Fazit:

- Pauli-Prinzip liefert also – (im Vergleich zur elektrostatischen Abschirmung)– wesentlich größeren Beitrag zur Reduktion des Streuquerschnitts
→ Erklärung für relativ große freie Weglänge der Leitungselektronen
- ähnliche Auswirkungen des Pauli-Prinzips:
 - spezifische Wärme der Metallelektronen:
 $C_{el} = \frac{\pi^2}{2} N \cdot k_B T$ anstelle $C_{el, klassisch} = \frac{3}{2} N$ → [Kap.6 aus Exp.phys.IVb]
 - Pauli-Paramagnetismus der Metallelektronen:
nur e^- aus Energiebereich $k_B T$ um ϵ_F können Spinrichtung durch thermische Anregung ändern
⇒ reduzierte magnetische Suszeptibilität → [Kap.5.3]