WALTHER–MEISSNER–INSTITUT 20. Januar 2011
für Tieftemperaturforschung
Bayerische Akademie der Wissenschaften
Prof. Dr. Rudolf Gross, PD Dr. Dietrich Einzel, Dr. Rudi Hackl
Tel.: 089 289 14218 **Blatt 12**

Übungsaufgaben zur

Festkörperphysik I, WS 2010/2011

7 Das freie Elektronengas

7.4 Druck und Kompressibilität eines Fermi-Gases

Aus der inneren Energie $U(S, V, N)$ eines Systems, welche als Funktion der Entropie S, des Volumens V und der Teilchenzahl N gegeben ist, lässt sich durch partielles Ableiten nach dem Volumen der im System herrschende Druck berechnen:

$$p = -\left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_{S,N} .$$

1. Zeigen Sie, dass ein Fermi-Gas mit der Fermi-Energie E_F auch am absoluten Nullpunkt der Temperatur einen "Fermi-Druck" besitzt, dessen Wert gegeben wird durch $p_0 = \frac{2}{5} n E_F(0)$.
2. Das Elektronengas von Alkalimetallen kann in guter Näherung als freies Elektronengas angesehen werden. Berechnen Sie den Fermi-Druck, welchen das Elektronengas im Innern von Kalium (innenzentriert kubisches Gitter, $a = 5.225$ Å) ausübt. Wie lässt es sich erklären, dass ein Metall angesichts des hohen Fermi-Drucks der Elektronen nicht explosionsartig zerfällt?
3. Die isotherme Kompressibilität $\kappa_T = -\frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T$ gibt Auskunft über die relative Änderung des Volumens V eines Systems, welche eine infinitesimale Änderung des Drucks p bei konstanter Temperatur bewirkt. Berechnen Sie die isotherme Kompressibilität von Kalium unter der Annahme, dass diese Größe im Wesentlichen durch den Fermi-Druck des Elektronengases bestimmt wird, und vergleichen Sie das Ergebnis mit dem experimentell bestimmten Wert $\kappa_T \simeq 3.1 \times 10^{-10}\,\mathrm{m}^2/\mathrm{N}$.

7.5 Frequenzabhängigkeit der elektrischen Leitfähigkeit eines Metalls

Gegeben sei ein Metall mit Volumen V und N Elektronen der Masse m und der Dichte $n = N/V$. Die elektronische Stromdichte $\mathbf{j}_e$ sei mit der Driftgeschwindigkeit $\mathbf{v}$ über

$$\mathbf{j}_e = en\mathbf{v}$$

verknüpft. In Anwesenheit eines elektrischen Feldes $\mathbf{E}(t)$ genügt $\mathbf{v}(t)$ der Relaxationsgleichung

$$m\left(\frac{\partial}{\partial t}+\frac{1}{\tau}\right)\mathbf{v}(t)=e\mathbf{E}(t)$$

mit τ der elektronischen Transportzeit.

1. Berechnen Sie die zeitabhängige Stromdichte $\mathbf{j}_e(t)$ für den Fall einer harmonischen Zeitabhängigkeit von $\mathbf{E}(t)=\mathbf{E}_0\exp(-i\omega t)$ und leiten Sie einen Ausdruck für die dynamische Leitfähigkeit $\sigma(\omega)=\delta\mathbf{j}_e/\delta\mathbf{E}$ im Limes $t/\tau\to\infty$ ab.
2. Benutzen Sie das Resultat für $\sigma(\omega)$, um mithilfe der Maxwell–Gleichungen die frequenzabhängige dielektrische Funktion $\epsilon(\omega)$ eines Metalls abzuleiten.
   Hinweis: Gehen Sie hierbei von der Definition (harmonische Zeitabhängigkeit $\partial/\partial t\to -i\omega$)
   $$\epsilon_0\epsilon(\omega)\mathbf{E}:=\epsilon_0\mathbf{E}+\frac{\mathbf{j}_e}{-i\omega}$$
   aus.
3. Berechnen Sie die frequenzabhängige elektromagnetische Eindringtiefe (Skintiefe) $\delta(\omega)$ für die elektrische ($\mathbf{E}$) und magnetische ($\mathbf{B}$) Feldstärke.
4. Wie lautet der Zusammenhang zwischen $\delta(\omega)$ und $\epsilon(\omega)$?

7.6 Leitfähigkeitstensor

Zeigen Sie, dass für einen tetragonalen Kristall die Leitfähigkeit in der Ebene senkrecht zur c-Achse isotrop ist.

WALTHER–MEISSNER–INSTITUT 20. Januar 2011
für Tieftemperaturforschung
Bayerische Akademie der Wissenschaften
Prof. Dr. Rudolf Gross, PD Dr. Dietrich Einzel, Dr. Rudi Hackl
Tel.: 089 289 14218 **Blatt 12**

Lösungen der Übungsaufgaben zur

Festkörperphysik I, WS 2010/2011

7 Das freie Elektronengas

7.4 Druck und Kompressibilität eines Fermi-Gases

Wir wissen, dass die Gesamtenergie $E_{\rm ges} = U$ eines Elektronengases gegeben ist durch

$$U = E_{\rm ges} = N\langle\epsilon_{\mathbf{k}}\rangle = \frac{3}{5}N\epsilon_{\rm F}$$

Die Ableitung dieses Sachverhalts sei an dieser Stelle nochmals kurz wiederholt:

$$\begin{aligned} U &= \sum_{\mathbf{k}\sigma}\epsilon_{\mathbf{k}}\theta(\epsilon_{\rm F}-\epsilon_{\mathbf{k}}) = 2\frac{V}{(2\pi)^3}\int d^3k\epsilon_{\mathbf{k}}\theta(\epsilon_{\rm F}-\epsilon_{\mathbf{k}}) = V\int_0^{\epsilon_{\rm F}} d\epsilon_{\mathbf{k}}N(\epsilon_{\mathbf{k}})\epsilon_{\mathbf{k}} \\ &= VN_{\rm F}\int_0^{\epsilon_{\rm F}} d\epsilon_{\mathbf{k}}\epsilon_{\mathbf{k}}\sqrt{\frac{\epsilon_{\mathbf{k}}}{\epsilon_{\rm F}}} = V\frac{3}{2}\frac{n}{\epsilon_{\rm F}}\epsilon_{\rm F}^2\underbrace{\int_0^1 d\left(\frac{\epsilon_{\mathbf{k}}}{\epsilon_{\rm F}}\right)\left(\frac{\epsilon_{\mathbf{k}}}{\epsilon_{\rm F}}\right)^{\frac{3}{2}}}_{=2/5} = \frac{3}{5}N\epsilon_{\rm F} \end{aligned}$$

1. Den Druck erhalten wir, indem wir die innere Energie nach dem Volumen ableiten:

$$\begin{aligned} p &= -\left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_{S,N} = -\frac{3}{5}N\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial}{\partial V}\left(3\pi^2\frac{N}{V}\right)^{\frac{2}{3}} \\ &= \frac{3}{5}N\frac{\hbar^2}{2m}\frac{2}{3}\frac{3\pi^2\frac{N}{V}}{\left(3\pi^2\frac{N}{V}\right)^{\frac{1}{3}}}\frac{1}{V} = \frac{2}{5}\frac{N}{V}\frac{\hbar^2}{2m}\left(3\pi^2\frac{N}{V}\right)^{\frac{2}{3}} = \frac{2}{5}n\epsilon_{\rm F} \end{aligned}$$

   Wir sehen, dass dieser Ausdruck gar nicht von der Temperatur abhängt. Das bedeutet, dass dieser Druck auch nicht bei $T = 0$ verschwindet, wie es z. B. für den kinetischen Druck klassischer Gase am absoluten Nullpunkt der Fall ist.

2. Kalium besitzt ein bcc-Gitter und die Einheitszelle enthält 2 Atome. Wir können annehmen, dass jedes Kaliumatom ein Elektron abgibt, d. h. die Ladungsträgerdichte ist gerade $n = 2/a^3 \simeq 1.4 \times 10^{28}\,\mathrm{m}^{-3}$. Damit errechnet sich die Fermi-Energie zu $E_F \simeq 3.4 \times 10^{-19}\,\mathrm{J}$, was etwas mehr als $2\,\mathrm{eV}$ entspricht. Damit können wir mit dem Ergebnis der vorangegangenen Teilaufgabe den Fermi-Druck berechnen. Er beträgt $p_0 = \frac{2}{5} n E_F \simeq 1.9 \times 10^9\,\mathrm{Pa}$. Dieser relativ große Druck in der Größenordnung von 10 kbar führt offensichtlich nicht dazu, dass der Kristall auseinanderfliegt. Dies bedeutet, dass die zusammenhaltende Wirkung der metallischen Bindung wesentlich größer ist.
3. Wir berechnen zunächst das Kompressionsmodul $B_T = 1/\kappa_T$. Für das Kompressionsmodul gilt

$$
\begin{aligned}
B_T &= -V \left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_T = -V \frac{\partial}{\partial V}\left[\frac{N}{V}\frac{2}{5}\frac{\hbar^2}{2m}\left(3\pi^2 \frac{N}{V}\right)^{\frac{2}{3}}\right] \\
&= -\frac{2}{3} V \frac{\partial}{\partial V}\left[\frac{U(V)}{V}\right] = -\frac{2}{3} V \left[-\frac{U(V)}{V^2} + \frac{1}{V}\frac{\partial U(V)}{\partial V}\right]
\end{aligned}
$$

Nun ist

$$
\frac{\partial U}{\partial V} = \frac{\partial}{\partial V}\left[\frac{3}{5} N \frac{\hbar^2}{2m}\left(3\pi^2 \frac{N}{V}\right)^{\frac{2}{3}}\right] = -\left[\frac{3}{5} N \frac{\hbar^2}{2m}\frac{2}{3}\left(3\pi^2 \frac{N}{V}\right)^{\frac{2}{3}} \frac{1}{V}\right] = -\frac{2}{5} n \epsilon_{\mathrm{F}} = -\frac{2}{3}\frac{U}{V}
$$

Damit wird

$$
B_T = -\frac{2}{3} V \left[-\frac{U}{V^2} - \frac{2}{3}\frac{U}{V^2}\right] = \frac{10}{9}\frac{U}{V} = \frac{2}{3} n \epsilon_{\mathrm{F}} \equiv \frac{5}{3} p
$$

Als Resultat für die isotherme Kompressibilität kann man somit schreiben

$$
\kappa_T = \frac{1}{B_T} = \frac{3}{2 n \epsilon_{\mathrm{F}}} = \frac{3}{5p}
$$

Beim idealen klassischen Gas erhält man aus der Zustandsgleichung $p(V,T) = N k_B T / V$ für das Kompressionsmodul $B_T = p$, also $\kappa_T = 1/p$. Dies weicht also kaum vom hier erhaltenen Resultat ab. Setzt man die Zahlenwerte aus 2. ein, so ergibt sich $\kappa_T \simeq 3.2 \times 10^{-10}\,\mathrm{Pa}^{-1}$. Dies stimmt mit den Experimenten gut überein. Normalerweise ist dies nicht der Fall, weil die Näherung freier Elektronen oft zu einfach ist. Insbesondere besitzen die positiven Ionenrümpfe, die hier gar nicht berücksichtigt wurden, einen signifikanten Einfluss auf die Kompressibilität eines Metalls.

7.5 Frequenzabhängigkeit der elektrischen Leitfähigkeit eines Metalls

Zu Beginn seien an dieser Stelle noch einmal die Maxwell–Gleichungen der Elektrodynamik wiederholt. Sie lauten in SI–Einheiten

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{H} &= \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} + \mathbf{j}_e \quad ; \quad \mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E} && \text{(i)} \\
\boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{E} &= -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad ; \quad \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H} && \text{(ii)} \\
\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{B} &= 0 && \text{(iii)} \\
\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{D} &= n_e && \text{(iv)}
\end{aligned}
$$

Diese Gleichungen werden ergänzt durch die konstitutive Relation

$$\mathbf{j}_e = \sigma \cdot \mathbf{E} \tag{v}$$

welche die Stromdichte $\mathbf{j}_e$ mit der elektrischen Feldstärke $\mathbf{E}$ über die elektronische Leitfähigkeit σ vernknüpft. Aus Gleichung (i) kann man durch Bildung der Divergenz ($\boldsymbol{\nabla} \cdot \ldots$) die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{j}_e = 0$$

für die elektronische Ladungsdichte n_e ableiten.

Bildet man dagegen die Rotation von Gleichung (i) ($\boldsymbol{\nabla} \times \ldots$), so erhält man

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\nabla} \times (\boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{H}) &= -\boldsymbol{\nabla}^2 \mathbf{H} + \boldsymbol{\nabla}(\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{H}) = -\left(\boldsymbol{\nabla}^2 - \boldsymbol{\nabla} : \boldsymbol{\nabla}\right) \mathbf{H} \\
-\left(\boldsymbol{\nabla}^2 - \boldsymbol{\nabla} : \boldsymbol{\nabla}\right) \mathbf{H} &= \frac{\partial}{\partial t} \boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{D} + \boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{j}_e \\
&= \epsilon_0 \frac{\partial}{\partial t} \boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{E} + \boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{j}_e \\
&\overset{\text{(ii)}}{=} -\epsilon_0 \frac{\partial^2 \mathbf{B}}{\partial t^2} + \boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{j}_e \\
&= -\mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial^2 \mathbf{H}}{\partial t^2} + \boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{j}_e
\end{aligned}$$

Dies führt mithilfe von $\mu_0 \epsilon_0 = 1/c^2$ auf die Gleichung

$$\left[\boldsymbol{\nabla}^2 - \boldsymbol{\nabla} : \boldsymbol{\nabla} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}\right] \mathbf{B} = -\mu_0 \boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{j}_e \tag{1}$$

die man, wie wir noch sehen werden, als Abschirmgleichung für das Magnetfeld interpretieren kann, aus der die magnetische Abschirmlänge (Skintiefe) berechnet werden kann.

Bildet man schließlich die Rotation von Gleichung (ii) ($\boldsymbol{\nabla} \times \ldots$) so ergibt sich

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\nabla} \times (\boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{E}) &= -\frac{\partial}{\partial t} \boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{B} = -\boldsymbol{\nabla}^2 \mathbf{E} + \boldsymbol{\nabla}(\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{E}) \\
-\left(\boldsymbol{\nabla}^2 - \boldsymbol{\nabla} : \boldsymbol{\nabla}\right) \mathbf{E} &= -\mu_0 \frac{\partial}{\partial t} \boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{H} \\
&= -\mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} - \mu_0 \frac{\partial \mathbf{j}_e}{\partial t}
\end{aligned}$$

Dies lässt sich zu folgender Gleichung zusammenfassen:

$$\left[\boldsymbol{\nabla}^2 - \boldsymbol{\nabla} : \boldsymbol{\nabla} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}\right] \mathbf{E} = \mu_0 \frac{\partial \mathbf{j}_e}{\partial t} \tag{2}$$

1. Um die Gleichungen (1) und (2) weiter behandeln zu können, benötigen wir den Zusammenhang zwischen der Stromdichte $\mathbf{j}_e$ und der elektrischen Feldstärke $\mathbf{E}$. Hierzu müssen wir die Relaxationsgleichung

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{\tau}\right) \mathbf{v}(t) = e \frac{\mathbf{E}(t)}{m}$$

lösen. Die allgemeine Lösung dieser inhomogenen Differentialgleichung 1. Ordnung lässt sich wie folgt angeben:

$$\mathbf{j}_e(t) = \mathbf{j}_e(0)\mathrm{e}^{-\frac{t}{\tau}} + \frac{ne^2}{m}\mathrm{e}^{-\frac{t}{\tau}} \underbrace{\int_0^t du\mathbf{E}(u)\mathrm{e}^{\frac{u}{\tau}}}_{(*)}$$

Mit der Annahme eines elektrischen Wechselfeldes der Form $\mathbf{E}(t) = \mathbf{E}_0 \exp(-i\omega t)$ kann man den Term (*) auswerten:

$$(*) \;=\; \mathbf{E}_0 \int_0^t du\mathrm{e}^{\left(-i\omega+\frac{1}{\tau}\right)u} = \frac{\mathbf{E}_0}{-i\omega+\frac{1}{\tau}}\left[\mathrm{e}^{\left(-i\omega+\frac{1}{\tau}\right)t} - 1\right]$$

Einsetzen in den Ausdruck für die Stromdichte liefert

$$\begin{aligned}\mathbf{j}_e(t) &= \mathbf{j}_e(0)\mathrm{e}^{-\frac{t}{\tau}} + \frac{ne^2}{m}\frac{\mathbf{E}_0}{-i\omega+\frac{1}{\tau}}\mathrm{e}^{-\frac{t}{\tau}}\left[\mathrm{e}^{\left(-i\omega+\frac{1}{\tau}\right)t} - 1\right] \\ &= \left[\mathbf{j}_e(0) - \frac{ne^2}{m\left(-i\omega+\frac{1}{\tau}\right)}\mathbf{E}_0\right]\mathrm{e}^{-\frac{t}{\tau}} + \frac{ne^2}{m\left(-i\omega+\frac{1}{\tau}\right)}\mathbf{E}(t)\end{aligned}$$

In diesem Resultat kann man als frequenzabhängige Leitfähigkeit identifizieren

$$\sigma(\omega) = \frac{ne^2}{m\left(-i\omega+\frac{1}{\tau}\right)} = \frac{ne^2\tau}{m\left(1-i\omega\tau\right)} = \frac{\sigma_0}{1-i\omega\tau} \quad ; \quad \sigma_0 = \frac{ne^2\tau}{m}$$

und die Stromdichte in der endgültigen Form

$$\mathbf{j}_e(t) \;=\; \left[\mathbf{j}_e(0) - \sigma(\omega)\mathbf{E}_0\right]\mathrm{e}^{-\frac{t}{\tau}} + \sigma(\omega)\mathbf{E}(t) \stackrel{t \gg \tau}{=} \sigma(\omega)\mathbf{E}(t)$$

schreiben.

2. Mit diesem Resultat können wir nun die dielektrische Funktion des Elektronensystems ableiten. Man kann nämlich definieren:

$$\epsilon_0\mathbf{E} + \frac{\mathbf{j}_e}{-i\omega} =: \epsilon_0\epsilon(\omega)\mathbf{E}$$

Mit der konstitutiven Relation $\mathbf{j}_e = \sigma(\omega)\mathbf{E}$ wird daraus

$$\begin{aligned}\epsilon_0\epsilon(\omega)\mathbf{E} &= \epsilon_0\mathbf{E} + \frac{i\sigma(\omega)}{\omega}\mathbf{E} \\ &= \epsilon_0 \underbrace{\left(1 + \frac{i\sigma(\omega)}{\omega\epsilon_0}\right)}_{=\epsilon(\omega)}\mathbf{E} \\ \epsilon(\omega) &= 1 + \frac{i\sigma(\omega)}{\omega\epsilon_0}\end{aligned}$$

Durch Einsetzen der dynamischen Leitfähigkeit $\sigma(\omega)$ wird daraus

$$\begin{aligned}\epsilon(\omega) &= 1 - \frac{1}{\omega^2}\underbrace{\frac{ne^2}{m\epsilon_0}}_{=\omega_\mathrm{p}^2}\frac{-i\omega\tau}{1-i\omega\tau} \\ &= 1 - \frac{\omega_\mathrm{p}^2}{\omega^2}\frac{-i\omega\tau}{1-i\omega\tau} \\ \omega_\mathrm{p}^2 &= \frac{ne^2}{m\epsilon_0}\end{aligned}$$

Hier ist ω_p die Plasmafrequenz des Elektronensystems.

3. Einsetzen von $\mathbf{j}_e = \sigma(\omega)\mathbf{E}$ in Gleichung (1) liefert

$$\left[\boldsymbol{\nabla}^2 - \boldsymbol{\nabla} : \boldsymbol{\nabla} + \frac{\omega^2}{c^2}\right]\mathbf{B} \quad = \quad -\mu_0 \boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{j}_e = -\mu_0\sigma(\omega)\boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{E} = \underbrace{-i\omega\sigma(\omega)\mu_0}_{=1/\delta^2(\omega)}\mathbf{B} = \frac{\mathbf{B}}{\delta^2(\omega)}$$

Wir können daher als Magnetfeld–Eindringtiefe (Skintiefe) identifizieren

$$\delta^2(\omega) \quad = \quad \frac{1}{-i\omega\sigma(\omega)\mu_0} = \underbrace{\frac{m}{\mu_0 n e^2}}_{=\delta_\infty^2}\frac{1-i\omega\tau}{-i\omega\tau} = \delta_\infty^2\frac{1-i\omega\tau}{-i\omega\tau}$$

Man beachte, dass die Skintiefe δ_∞ (stoßloser Limes) vermittels der Relation $\mu_0\epsilon_0 = 1/c^2$ auch durch die Plasmafrequenz ω_p ausgedrückt werden kann:

$$\delta_\infty^2 = \frac{m}{\mu_0 n e^2} = \frac{c^2}{\omega_\mathrm{p}^2}$$

Diese Gleichung kann man nun noch auf die Form einer Wellengleichung für $\mathbf{B}$ bringen:

$$\left[\boldsymbol{\nabla}^2 - \boldsymbol{\nabla} : \boldsymbol{\nabla} + \mu_0\epsilon_0\omega^2 \underbrace{\left(1 - \frac{\omega_\mathrm{p}^2}{\omega^2}\frac{-i\omega\tau}{1-i\omega\tau}\right)}_{=\epsilon(\omega)}\right]\mathbf{B} = 0 \tag{3}$$

und man erkennt, daß die Berücksichtigung der Stromdichte $\mathbf{j}_e$ auf der rechten Gleichungsseite wieder zu der Ersetzung $\epsilon_0 \to \epsilon_0\epsilon(\omega)$ führt.
Um zu zeigen, dass die elektrische Feldstärke $\mathbf{E}$, genau wie $\mathbf{B}$, einer Wellengleichung (3) genügt, setzen wir die Stromdichte in Gleichung (2) ein und erhalten

$$\left[\boldsymbol{\nabla}^2 - \boldsymbol{\nabla} : \boldsymbol{\nabla} + \frac{\omega^2}{c^2}\right]\mathbf{E} \quad = \quad \mu_0\frac{\partial \mathbf{j}_e}{\partial t} = \underbrace{-i\omega\mu_0\sigma(\omega)}_{1/\delta^2(\omega)}\mathbf{E} = \frac{\mathbf{E}}{\delta^2(\omega)}$$

Dies lässt sich umschreiben in eine Gleichung, die mit (3) bis auf die Ersetzung $\mathbf{B} \leftrightarrow \mathbf{E}$ identisch ist.

$$\left[\boldsymbol{\nabla}^2 - \boldsymbol{\nabla} : \boldsymbol{\nabla} + \frac{\omega^2}{c^2}\underbrace{\left(1 + \frac{i\sigma(\omega)}{\omega\epsilon_0}\right)}_{=\epsilon(\omega)}\right]\mathbf{E} = 0 \tag{4}$$

Dieses Resultat bedeutet, dass auch das $\mathbf{E}$–Feld aus dem Inneren des Metalls abgeschirmt wird und zwar mit derselben Abschirmlänge $\delta(\omega)$ wie das $\mathbf{B}$–Feld.

4. Der Zusammenhang zwischen der dielektrischen Funktion $\epsilon(\omega)$ und der elektromagnetischen Skintiefe $\delta(\omega)$ lautet

$$\begin{aligned}
\epsilon(\omega) &= 1-\frac{\omega_\mathrm{p}^2}{\omega^2}\frac{-i\omega\tau}{1-i\omega\tau} \\
&= 1-\frac{c^2}{\omega^2}\underbrace{\frac{\omega_\mathrm{p}^2}{c^2}}_{=1/\delta_\infty^2}\frac{-i\omega\tau}{1-i\omega\tau} \\
&= 1-\frac{c^2}{\omega^2}\underbrace{\frac{1}{\delta_\infty^2}\frac{-i\omega\tau}{1-i\omega\tau}}_{=1/\delta^2(\omega)} \\
&= 1-\frac{c^2}{\omega^2}\frac{1}{\delta^2(\omega)}
\end{aligned}$$

7.6 Leitfähigkeitstensor

Für ein anisotropes Medium können wir allgemein

$$\mathbf{j}_e = \boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{E}$$

schreiben, wobei $\boldsymbol{\sigma}$ der Leitfähigkeitstensor ist. Um das Anisotropieverhalten der Leitfähigkeit eines tetragonalen Kristalls zu untersuchen, führen wir Drehungen um die z- und x-Achse durch, die das tetragonale Gitter in sich selbst überführen. Solche Symmetrieoperationen sind im allgemeinen Drehungen um einen Winkel θ und um eine Achse $\mathbf{n}$, die wir durch die Rotationsmatrix

$$\begin{aligned}
\mathrm{R}_{\mu\nu}(\mathbf{n},\theta) &= \cos\theta\delta_{\mu\nu}+(1-\cos\theta)\hat{\mathbf{n}}_\mu\hat{\mathbf{n}}_\nu-\sin\theta\epsilon_{\mu\nu\lambda}\hat{\mathbf{n}}_\lambda \\
&= \begin{pmatrix} \cos\theta+(1-\cos\theta)\hat{\mathbf{n}}_x^2 & -\sin\theta\hat{\mathbf{n}}_z & \sin\theta\hat{\mathbf{n}}_y \\ \sin\theta\hat{\mathbf{n}}_z & \cos\theta+(1-\cos\theta)\hat{\mathbf{n}}_y^2 & -\sin\theta\hat{\mathbf{n}}_x \\ -\sin\theta\hat{\mathbf{n}}_y & \sin\theta\hat{\mathbf{n}}_x & \cos\theta+(1-\cos\theta)\hat{\mathbf{n}}_z^2 \end{pmatrix}_{\mu\nu}
\end{aligned}$$

beschreiben können. ($\epsilon_{\mu\nu\lambda}$ ist der vollständig antisymmetrische Tensor. $\epsilon_{\mu\nu\lambda}=\pm1$ für gerade [(123), (231), (312)] bzw. ungerade [(213) etc.] Permutationen von $\mu\nu\lambda$ und 0 sonst, insbesondere wenn 2 oder mehr Indizes gleich sind.) Die inverse Matrix entspricht der inversen Drehung:

$$\begin{aligned}
\mathbf{R}^{-1}(\mathbf{n},\theta) &= \mathbf{R}(\mathbf{n},-\theta)=\mathbf{R}^T(\mathbf{n},\theta) \\
&= \begin{pmatrix} \cos\theta+(1-\cos\theta)\hat{\mathbf{n}}_x^2 & \sin\theta\hat{\mathbf{n}}_z & -\sin\theta\hat{\mathbf{n}}_y \\ -\sin\theta\hat{\mathbf{n}}_z & \cos\theta+(1-\cos\theta)\hat{\mathbf{n}}_y^2 & \sin\theta\hat{\mathbf{n}}_x \\ \sin\theta\hat{\mathbf{n}}_y & -\sin\theta\hat{\mathbf{n}}_x & \cos\theta+(1-\cos\theta)\hat{\mathbf{n}}_z^2 \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

Als Spezialfälle hiervon kann man Drehungen um die $\hat{\mathbf{z}}$–Achse

$$\mathbf{R}(\hat{\mathbf{z}},\theta) \;=:\; \mathbf{U}_\theta^z = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta & 0 \\ \sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

und um die $\hat{\mathbf{x}}$–Achse betrachten:

$$\mathbf{R}(\hat{\mathbf{x}},\theta) \;=:\; \mathbf{U}_\theta^x = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\theta & -\sin\theta \\ 0 & \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}$$

Für einen Kristall gegebener Symmetrie kann man jetzt Transformationen untersuchen, welche denselben invariant lassen:

$$\mathbf{j}'_e \;=\; \mathbf{U}^{\hat{\mathbf{n}}}_\theta \cdot \mathbf{j}_e \;\;;\;\; \mathbf{E}' = \mathbf{U}^{\hat{\mathbf{n}}}_\theta \cdot \mathbf{E}$$

Damit transformiert sich die elektronische Leitfähigkeit gemäß:

$$\boldsymbol{\sigma}' \;=\; \mathbf{U}^{\hat{\mathbf{n}}}_\theta \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \{\mathbf{U}^{\hat{\mathbf{n}}}_\theta\}^{-1} = \boldsymbol{\sigma}$$

Die letzte Gleichheit enspricht dem Fall, dass die Symmetrieoperation einer Gittersymmetrie entspricht. Für tetragonale Kristalle gibt es zwei solcher Symmetrieoperationen

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma} &= \mathbf{U}^x_\pi \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \{\mathbf{U}^x_\pi\}^{-1} && \text{(i)} \\ \boldsymbol{\sigma} &= \mathbf{U}^z_{\frac{\pi}{2}} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \{\mathbf{U}^z_{\frac{\pi}{2}}\}^{-1} && \text{(ii)} \end{aligned}$$

Aus der Bedingung (i) ergibt sich

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & -\sigma_{xy} & -\sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & -\sigma_{yy} & -\sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & -\sigma_{zy} & -\sigma_{zz} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & -\sigma_{xy} & -\sigma_{xz} \\ -\sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ -\sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Daraus folgen sofort die Bedingungen

$$\begin{aligned} \sigma_{xy} &= -\sigma_{xy} = 0 \\ \sigma_{yx} &= -\sigma_{yx} = 0 \\ \sigma_{xz} &= -\sigma_{xz} = 0 \\ \sigma_{zx} &= -\sigma_{zx} = 0 \end{aligned}$$

und der Leitfähigkeitstensor reduziert sich auf die Form

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ 0 & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{pmatrix}$$

Aus der zweiten Bedingung (ii) ergibt sich

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma} &= \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} -\sigma_{xy} & \sigma_{xx} & \sigma_{xz} \\ -\sigma_{yy} & \sigma_{yx} & \sigma_{yz} \\ -\sigma_{zy} & \sigma_{zx} & \sigma_{zz} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \sigma_{yy} & -\sigma_{yx} & -\sigma_{yz} \\ -\sigma_{xy} & \sigma_{xx} & \sigma_{xz} \\ -\sigma_{zy} & \sigma_{zx} & \sigma_{zz} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Dies liefert die zusätzlichen Bedingungen

$$\begin{aligned}
\sigma_{yy} &= \sigma_{xx} \\
\sigma_{yz} &= \sigma_{xz} = 0 \\
\sigma_{zy} &= \sigma_{zx} = 0
\end{aligned}$$

so dass wir folgenden Leitfähigkeitstensor erhalten:

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{xx} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{zz} \end{pmatrix}$$

Der so gefundene Leitfähigkeitstensor eines Metalls mit tetragonaler Gittersymmetrie ist somit isotrop in der xy–Ebene.