Übungen zur Vorlesung Festkörperphysik WS 07/08

Prof. G. Maret

Blatt 7, Besprechung am 13./14.12.07

1. Aufgabe: Chemisches Potential des Fermigases
a) Berechnen Sie das chemische Potential $\mu = (\partial U/\partial N)_{S,V}$ eines idealen Fermigases. Gehen Sie dabei von dem Resultat aus, dass Teilchen eines dreidimensionalen idealen Fermigases bei T=0 K die mittlere Energie $\langle U \rangle = \frac{3}{5} E_F$ besitzen. b) Mittels einer temperaturabhängigen Betrachtung soll gezeigt werden, dass die Beziehung $\mu(T=0) = E_F$ für Fermigase allgemeine Gültigkeit besitzt.
Das chemische Potential μ ist gegeben durch die Bestimmungsgleichung

$$N = \int_0^\infty D(E) f(E,T) dE.$$

Hierbei ist N die Gesamtzahl der Elektronen, D(E) die dreidimensionale Zustandsdichte und f(E,T) die Fermi-Verteilung. Bestimmen Sie μ, indem Sie N für den Fall $\mu \gg k_B T$ entwickeln mit Hilfe von

$$\int_0^\infty = \frac{\sqrt{x}}{e^{x-a}+1} dx = \frac{\alpha^{3/2}}{3/2} \left(1 + \frac{\pi^2}{8\alpha^2} + O(\alpha^{-4}) \right)$$

für $\alpha := \mu/k_B T \gg 1$ und $x := E/k_B T$.
Die Gültigkeit der Entwicklung nach α beruht auf der Tatsache, dass experimentell relevante Temperaturen gewöhnlich weit unterhalb der Fermi-Temperatur liegen. (Für T=300 K gilt: $k_B T/\mu \cong 0,01$.)

2. Elektronen im schwachen, periodischen Potential
Die Energie der freien Elektronen ist gegeben durch $E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$. Durch die Einführung eines schwachen, periodischen Potentials $V(x)$ entstehen in der Dispersion $E(k)$ Energielücken bei $k = \pm\frac{n\pi}{a}$, $n = 0$, 1, 2, ... (Bragg-Reflexion), vergleiche Abb. 1. Die Aufspaltung $E_\pm$ am Zonenrand bei $k = \pm\frac{\pi}{a}$ soll berechnet werden. Benutzen Sie die Fourierdarstellung des (schwachen) Potentials:

$$V(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} V_m \, e^{2\pi i m x/a}$$

mit $V_0 = 0$; a = Gitterkonstante. a) Stellen Sie die Schrödingergleichung mit der Blochfunktion auf:

$$\Psi(x) = u(x) e^{ikx} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n \, e^{2\pi i n x/a} \, e^{ikx}$$

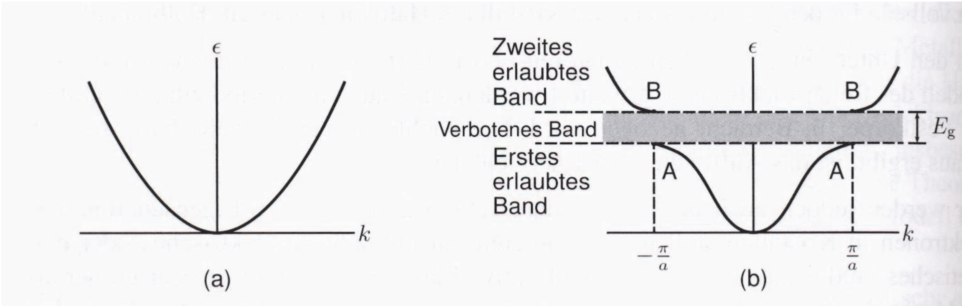

Abbildung 1: (a) *Energie ϵ in Abhängigkeit von der Wellenzahl k für ein freies Elektron. (b) Energie in Abhängigkeit von der Wellenzahl für ein Elektron in einem linearen monoatomaren Gitter der Gitterkonstanten a. Die eingezeichnete Energielücke E_g hängt mit der ersten Bragg-Reflexion bei $k = \pm\pi/a$ zusammen; weitere Lücken treten bei $\pm n\pi/a$ auf (n ist ganzzahlig).*

Multiplizieren Sie sie mit $e^{-i2\pi n'x/a}$ und benutzen Sie die Orthogonalitätsrelation:

$$\int_0^a dx\ e^{-i2\pi n'x/a}\ e^{2\pi inx/a} = a\delta_{n'n}$$

Bestimmen Sie für gegebene $V_{n'}$ die Koeffizienten c_n.
b) Nehmen Sie $k = \pm\pi/a$ und $E(k) = \frac{\hbar^2k^2}{2m}$ für die "quasi"-freien Elektronen an. Zeigen Sie, dass nur c_0 und c_1 einen wesentlichen Beitrag liefern.
c) Bestimmen Sie diese Koeffizienten mittels des Ansatzes $E(k) = \frac{\hbar^2}{2m}(-\frac{\pi}{a})^2 + \varepsilon$ und $k = -\frac{\pi}{a} + \delta$, mit ε und δ klein. Aus dem Gleichungssystem für c_0 und c_1 folgt eine Bestimmungsgleichung für ε. Vernachlässigen Sie dabei Terme der Ordnung $O(\delta^4)$. Geben Sie $E_\pm = \frac{\hbar^2k^2}{2m} + \varepsilon_\pm$ und die Gap-Energie $E_g = E_+ - E_-$ an.

3. Zustandsdichte eines 2D Systems quasigebundener Elektronen

Relativ zur Bandmitte wird die Energie-Wellenvektor-Beziehung eines zweidimensionalen Systems von Elektronen, welches einer starken Bindung zu den Ionenrümpfen eines Kristallgitters der Gitterkonstante a unterliegt, gegeben durch $E(\mathbf{k}) = -2t(cos(ak_x) + cos(ak_y))$. Das Austauschintegral t stellt dabei ein Maß für die Breite des Energiebandes dar, und kann sowohl positives als auch negatives Vorzeichen besitzen. In Abb. 2 sind Linien konstanter Energie für Zustände in der 1. Brillouinzone abgebildet.
(a) Die Zustandsdichtefunktion $D(E)$ des betrachteten Systems ist symmetrisch zur Mitte E=0 des Energiebandes. Begründen Sie dies qualitativ.
(b) Zeigen Sie, dass die Zustandsdichte des Systems für $E \approx 4|t|$, also für Energien nahe der unteren bzw. oberen Bandkante, den konstanten Wert

$$D(E) \approx \frac{A}{4\pi a^2|t|}$$

besitzt. A ist die Fläche, welche dem zweidimensionalen Elektronengas im realen Raum zur Verfügung steht.

(c) Zeigen Sie, daß sich die Zustandsdichte des Systems in unmittelbarer Nähe der Bandmitte E=0 zu

$$D(E) \approx \frac{A}{2\pi^2 a^2 |t|}[2.04 + \ln(|2t/E|)]$$

ergibt, und skizzieren Sie den nach (1) und (2) zu erwartenden Verlauf von $D(E)$ im gesamten Energiebereich.
Hinweis: Führen Sie den Parameter $\epsilon = -E/2t$ ein, und berechnen Sie für $|\epsilon| << 1$ das Wegintegral

$$D(E) = \frac{A}{(2\pi)^2} \oint_{E(\mathbf{k})=E} \frac{\mathrm{d}l_k}{|grad_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k})|} \quad .$$

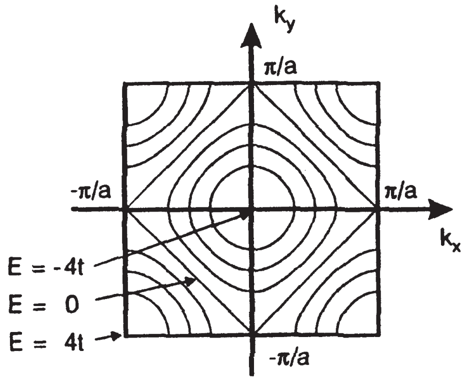

Abbildung 2: *Linien konstanter Energie für ein zweidimensionales quasigebundenes Elektronengas.*