Heiko Dumlich 11. Dezember 2006

# 7 Übungsblatt Festkörperphysik

## 7.1 (Kinetische Energie des freien Elektronengases)

Es ist zu zeigen, dass die kinetische Energie des freien Elektronengases (in drei Dimensionen) bei $T = 0\,K$ gegeben ist durch:

$$U_0 = \frac{3}{5} N E_F,$$

wobei $E_F$ die Fermi-Energie sei mit:

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{3\pi^2 N}{V}\right)^{\frac{2}{3}}$$

und $N$ die Anzahl der freien Elektronen. Für die kinetische Energie des freien Elektronengases folgt nun:

$$U_0 = \langle E \rangle = \int_0^{E_F} E \cdot D\left(E\right)\, dE,$$

wobei $D\left(E\right) = \frac{dN}{dE} = \frac{V}{2\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}\sqrt{E}$ die Zustandsdichte ist, mit der Anzahl der Zustände $N\left(E\right) = \frac{V}{3\pi^2}\left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}$. Wir können einsetzen:

$$U_0 = \int_0^{E_F} \frac{V}{2\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} E^{\frac{3}{2}}\, dE = \frac{V}{2\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \int_0^{E_F} E^{\frac{3}{2}}\, dE = \frac{V}{2\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \left[\frac{2}{5}E^{\frac{5}{2}}\right]_0^{E_F},$$

Wir können nun $N\left(E_F\right)$ einsetzen und erhalten:

$$U_0 = \frac{3}{2}\underbrace{\frac{V}{3\pi^2}\left(\frac{2mE_F}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}}_{N(E_F)}\frac{2}{5}E_F = \frac{3}{5}N\left(E_F\right)E_F = \frac{3}{5}NE_F.$$

Dies war zu zeigen.

## 7.2 (Freies Elektronengas von Lithium und Blei)

Es sind die Daten über die Dichten und die molaren Massen der Atome von Lithium und Blei bekannt. Aus diesen sind die Dichte der freien Elektronen und verschiedene Fermi-Größen zu bestimmen. Wir bestimmen zuerst die Dichte der freien Elektronen für das Lithium und anschließend für das Blei.

Es gilt für die Dichte des gesamten Atoms $\rho = \frac{m}{V} = \frac{M \cdot N}{V} = M \cdot \frac{N}{V} = M \cdot n$, mit $M$ der molaren Masse, $V$ dem Volumen, $N$ der Teilchenanzahl und $n$ der Teilchendichte. Wir können umstellen und einsetzen:

$$n = \frac{\rho}{M} = 1 \cdot \frac{0.53 \, \frac{g}{cm^3}}{6.939 \, \frac{g}{mol}} = 0.0764 \, \frac{mol}{cm^3}.$$

Nun können wir noch mit der Avogadrokonstante multiplizieren, wobei diese $N_A = 6.022 \cdot 10^{23} \, \frac{1}{mol}$ beträgt:

$$n = 0.0764 \cdot 6.022 \cdot 10^{23} \, \frac{1}{mol} \, \frac{mol}{cm^3} = 4.60 \cdot 10^{22} \, \frac{1}{cm^3},$$

da wir nur ein freies Elektron (Valenzelektron) für das Lithium besitzen $1s^2 \, 2s^1$-Konfiguration, müssen wir mit 1 multiplizieren und erhalten für die Elektronendichte:

$$n = 4.60 \cdot 10^{22} \, \frac{1}{cm^3}.$$

Für den Literaturwert findet sich auf Folie FKP_V14.pdf ein Wert von $n = 4.7 \cdot 10^{22} \, \frac{1}{cm^3}$, dies resultiert daher, dass in der gegebenen Tabelle anders gerundet wurde, da der Literaturwert für die Dichte von Lithium mit $\rho = 0.535 \, \frac{g}{cm^3}$ gefunden werden kann. Für Rechnung mit dem gerundeten Wert $\rho = 0.54 \, \frac{g}{cm^3}$ ergibt sich auch durch runden des Ergebnisses von $n = 4.69 \cdot 10^{22} \, \frac{1}{cm^3}$ der gefundene Literaturwert.

Beim Blei besitzen wir eine Elektronenkonfiguration von [Xe] $6s^2 \, 6p^2$, besitzen also 4 freie Elektronen, daher müssen wir den Wert von $n$, der sich auf die Atomanzahl bezieht, mit 4 multiplizieren, um die freien Elektronen zu erfassen. Einsetzen der gegebenen Werte für Blei und multiplikation mit dem Faktor 4 liefert:

$$n = 4 \cdot \frac{11.34 \, \frac{g}{cm^3}}{207.19 \, \frac{g}{mol}} = 0.219 \, \frac{mol}{cm^3} = 13.18 \cdot 10^{22} \, \frac{1}{cm^3} = 13.2 \cdot 10^{22} \, \frac{1}{cm^3}.$$

Dieser Wert stimmt mit dem Literaturwert überein.

Zur Bestimmung der Fermi-Größen können wir nun $\frac{N}{V} = n$ einsetzen, somit gelten für die Fermi-Größen die Beziehungen:

$$\begin{aligned}
k_F &= \left(3\pi^2 n\right)^{\frac{1}{3}} \\
E_F &= \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \\
v_F &= \frac{\hbar k_F}{m} \\
T_F &= \frac{E_F}{k_B}.
\end{aligned}$$

Einsetzen der Werte liefert:

$$\begin{aligned}
k_{F,Li} &= 1.108 \cdot 10^8 \, \frac{1}{cm} \\
E_{F,Li} &= 7.50 \cdot 10^{-19} \, J = 4.68 \, eV \\
v_{F,Li} &= 1.28 \cdot 10^8 \, \frac{cm}{s} \\
T_{F,Li} &= 5.43 \cdot 10^4 \, K
\end{aligned}$$

Die Werte stimmen im Rahmen der Rundungen (Diskussion zu dieser s. oben) mit den Werten in der Literatur-Tabelle überein.

Für das Blei folgen mit $n = 13.18 \cdot 10^{22}\, \frac{1}{cm^3}$, die Fermi-Größen mit:

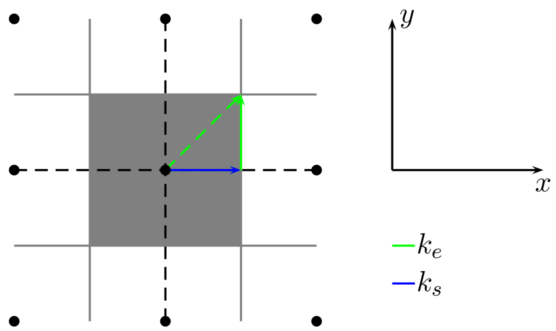
$$\begin{aligned} k_F &= 1.574 \cdot 10^8\, \frac{1}{cm} \\ E_F &= 1.513 \cdot 10^{-18}\, J = 9.45\, eV \\ v_F &= 1.823 \cdot 10^8\, \frac{cm}{s} \\ T_F &= 1.096 \cdot 10^5\, K. \end{aligned}$$

Auch diese Werte stimmen mit den Werten der Literatur überein.

## 7.3 (Freie Elektronen im quadratischen und im kubischen Gitter)

### (a)

Wie wir in folgender Zeichnung erkennen, beträgt $k_{x,s} = \frac{1}{2}$, $k_{y,s} = 0$ während $k_{x,e} = \frac{1}{2}$, $k_{y,e} = \frac{1}{2}$ beträgt.




*Quadratgitter in 2D*

Nun gilt jedoch für die kinetische Energie:

$$T = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_k k^2 C(k)\, e^{ikx},$$

für uns ist in diesem Fall nur das Verhältnis wichtig. Wir erhalten durch die Summe im Fall der Seitenmitte:

$$T_s = \frac{1}{4} \cdot \frac{\hbar^2}{2m} C\left(\frac{1}{2}\right) e^{\frac{i}{2}x},$$

und für die Ecke der Brillouinzone erhalten wir:

$$T_e = 2 \cdot \frac{1}{4} \cdot \frac{\hbar^2}{2m} C\left(\frac{1}{2}\right) e^{\frac{i}{2}x}.$$

Der Vergleich der beiden Größen liefert also sofort:

$$T_e = 2\, T_s.$$

**(b)**

Für den dreidimensionalen Fall, folgt für den Mittelpunkt der Seitenfläche $k_{x,s} = 0$, $k_{y,s} = \frac{1}{2}$, $k_{z,s} = 0$, während für den Eckpunkt $k_{x,s} = \frac{1}{2}$, $k_{y,s} = \frac{1}{2}$, $k_{z,s} = \frac{1}{2}$, folgt. Somit folgt also für die kinetische Energie ein Verhältnis von:

$$T_e = 3\,T_s.$$

## 7.4 (Zustandsdichte eines freien Elektronengases in einer Dimension)

Der Quantendraht besitze die Randbedingungen $\psi(x, y, z) = 0$ für $|x| > a$ und $|y| > b$, wo $a$ und $b$ atomare Dimensionen haben, sowie periodische in $z$-Richtung : $\psi(x, y, z + L) = \psi(x, y, z)$ . Dies bedeutet, wir besitzen einen sehr dünnen Draht, der in $z$-Richtung liegt, wobei die Ausdehnung in $x$- und $y$-Richtung atomare Dimension besitzt, d.h. sehr klein ist, speziell gegenüber der $z$-Richtung.

**(a)**

Es ist zu zeigen, dass die Energie in ein-dimensionale Subbänder aufspaltet, d.h. $E(k)$ geschrieben werden kann als:

$$E(k) = E_{n1,n2} + \frac{\hbar^2}{2m}k^2.$$

Wir betrachten die Schrödinger Gleichung:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}).$$

Wir machen den Ansatz:

$$\psi(\vec{r}) = A\sin\left(\frac{\pi n_1 x}{a}\right)\sin\left(\frac{\pi n_2 y}{b}\right)\sin\left(\frac{\pi n_3 z}{L}\right) = A\sin\left(\frac{\pi n_1 x}{a}\right)\sin\left(\frac{\pi n_2 y}{b}\right)\exp(ik_z z),$$

da wir für die $z$-Komponente eine periodische Randbedingung besitzen, muss die Wellenfunktion $\psi(x, y, z) = \psi(x, y, z + L)$ erfüllen, während wir für die $x-$und $y$-Komponente die Randbedingungen:

$$\psi(|a|, y, z) = 0 \quad \text{und} \quad \psi(x, |b|, z) = 0$$

besitzen. Wir erhalten somit durch einsetzen in die Schrödingergleichung:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(-\left(\frac{\pi n_1}{a}\right)^2 - \left(\frac{\pi n_2}{b}\right)^2 - k_z^2\right) = E,$$

somit erhalten wir also tatsächlich die zwei 1D-Subbänder:

$$E_{n1} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi n_1}{a}\right)^2 \quad \text{und} \quad E_{n2} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi n_2}{b}\right)^2,$$

wobei wir auch schreiben können:

$$E_{n1,n2} = \frac{\hbar^2}{2m}\left[\left(\frac{\pi n_1}{a}\right)^2 + \left(\frac{\pi n_2}{b}\right)^2\right].$$

Da die $x-$ und $y$-Komponenten sehr klein gegenüber der $z$-Komponente sind, können wir $k_z = k$ setzen und somit erhalten wir das gesuchte Ergebnis:

$$E(k) = E_{n1,n2} + \frac{\hbar^2}{2m}k^2.$$

## (b)

Es ist zu zeigen, dass die Zustandsdichte gemäß der Formel:

$$D(E) = \frac{dN}{dk}\frac{dk}{dE} = D(k)\left(\frac{dE}{dk}\right)^{-1},$$

durch:

$$D(E) = \frac{2L}{\pi}\left[\frac{m}{2\hbar^2(E - E_{n1,n2})}\right]^{\frac{1}{2}},$$

dargestellt werden kann. Wir können zuerst die Ableitung von k in $E$-Richtung bestimmen, wobei wir aus Aufgabenteil a) nach $k$ umstellen können:

$$k = \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}}(E(k) - E_{n1,n2})^{\frac{1}{2}}$$

Die Ableitung liefert nun:

$$\frac{dk}{dE} = \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}}\frac{1}{2}\cdot(E(k) - E_{n1,n2})^{-\frac{1}{2}} = \left[\frac{m}{2\hbar^2(E - E_{n1,n2})}\right]^{\frac{1}{2}},$$

Nun müssen wir nur noch $D(k)$ bestimmen, wobei wir uns die Zustandsdichte des Quantendrahtes als ein-dimensional vorstellen können, somit folgt für den Quantendraht:

$$D(k_z) = \frac{L}{2\pi}.$$

Nun müssen wir jedoch beachten, dass wir noch zusätzlich die diskreten Energieeigenwerte in der $xy$-Ebene besitzen, wobei wir hierdurch jeweils einen Faktor 2 erhalten, der aus dem Spin resultiert, somit insgesamt einen Faktor 4. Somit erhalten wir also:

$$D(k) = 4\frac{L}{2\pi} = \frac{2L}{\pi}.$$

Wir erhalten also durch Einsetzen das gewünschte Ergebnis:

$$D(E) = \frac{2L}{\pi}\left[\frac{m}{2\hbar^2(E - E_{n1,n2})}\right]^{\frac{1}{2}}.$$