6 Blatt - Festkörperphysik 2 - Tunnelspektroskopie und elektronische Struktur

6.1 (Tunnelwahrscheinlichkeit)

Es sind die folgenden Tunnelwahrscheinlichkeiten abzuschätzen:

a)

für einen Löwen der Masse $m = 200\,\text{kg}$, der 2 m hoch springt und eine 2.5 m hohe und $10\,\text{cm} = 0.1\,\text{m}$ dicke Barriere durchtunneln möchte. Die potentielle Energie des Löwen beträgt

$$E = mgh = 3924\,J$$

Die Tunnelwahrscheinlichkeit ist gegeben mit:

$$T = \frac{16\kappa^2 k^2}{\kappa^2 + k^2} \exp\left(-2\kappa s\right) = 16 \cdot \frac{2m}{\hbar^2} \frac{E}{V} \left(V - E\right) \cdot \exp\left(-2\kappa s\right)$$

wobei $k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E}$ und $\kappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}\left(V - E\right)}$. Hierbei is $s = 0.1\,\text{m}$, $m = 200\,\text{kg}$, $E = 3924\,\text{J}$ und $V = 4905\,\text{J}$. Einsetzen liefert:

$$\begin{aligned}
\kappa &= 5.94 \cdot 10^{36} \frac{1}{m} \\
k &= 1.19 \cdot 10^{37} \frac{1}{m}
\end{aligned}$$

was zu einer Tunnelwahrscheinlichkeit von:

$$\begin{aligned}
T &= \frac{16 \cdot 3.53 \cdot 10^{73} \cdot 1.42 \cdot 10^{74}}{1.77 \cdot 10^{74}} \exp\left(-1.19 \cdot 10^{36}\right) \frac{1}{\text{m}^2} \\
&= 4.53 \cdot 10^{74} \cdot \exp\left(-1.19 \cdot 10^{36}\right) \frac{1}{\text{m}^2} \\
&= \exp\left(\ln\left(4.53\right) + 74 \ln\left(10\right)\right) \cdot \exp\left(-1.19 \cdot 10^{36}\right) \frac{1}{\text{m}^2} \\
&\approx \exp\left(-10^{36}\right) \frac{1}{\text{m}^2} \\
&\approx 0 \frac{1}{\text{m}^2}
\end{aligned}$$

führt.
Alternativ mit der Formel:

$$T = \frac{16E}{V^2} \left(V - E\right) \exp\left(-2\kappa s\right)$$

(bekannt aus Experimentalphysik III, Herleitung auf Übungsblatt 7), folgt:

$$T = 2.56 \cdot \exp\left(-1.19 \cdot 10^{36}\right)$$

was auch gegen 0 strebt, da der Vorfaktor sehr gering ist. Hier haben wir eine dimensionslose Größe, die für den "eindimensionalen" Fall Sinn macht.

b)

für ein Elektron, mit einer Energie von $E = 2\,\mathrm{eV} = 3.2 \cdot 10^{-19}\,\mathrm{J}$, welches eine $V = 4\,\mathrm{eV} = 6.4 \cdot 10^{-19}\,\mathrm{J}$ hohe und $s = 5\,\text{Å} = 5 \cdot 10^{-10}\,\mathrm{m}$ breite Barriere durchtunneln möchte.

Die Tunnelwahrscheinlichkeit ist wieder gegeben mit:

$$T = \frac{16\kappa^2 k^2}{\kappa^2 + k^2} \exp\left(-2\kappa s\right)$$

Hierbei ist $m = m_e = 9.109 \cdot 10^{-31}\,\mathrm{kg}$.
Einsetzen liefert:

$$\begin{aligned}
\kappa &= 7.24 \cdot 10^9 \,\frac{1}{m} \\
k &= 7.24 \cdot 10^9 \,\frac{1}{m}
\end{aligned}$$

was zu einer Tunnelwahrscheinlichkeit von:

$$T = 3 \cdot 10^{17} \,\frac{1}{\mathrm{m}^2} = 3 \cdot 10^{-3} \,\frac{1}{\text{Å}^2}$$

führt.
Alternativ mit der Formel:

$$T = \frac{16E}{V^2} \left(V - E\right) \exp\left(-2\kappa s\right)$$

folgt:

$$T = 0.00286 = 2.86 \cdot 10^{-3}$$

6.2 (Fermi-Energie)

a)

Wir betrachten den Fall $T = 0\,\mathrm{K}$. Es ist die Fermi-Energie eines 2D-freien Elektronengases als Funktion der Elektronendichte anzugeben. Die Anzahl der Zustände in der 2D-Kugel mit Radius k_F ist gegeben mit

$$N\left(k_F\right) = 2 \cdot \frac{\pi k_F^2}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2} = \frac{k_F^2 L^2}{2\pi}$$

mit $k_F^2 = \frac{2mE_F}{\hbar^2}$ folgt somit

$$E_F = \frac{\pi\hbar^2}{m}\frac{N}{L^2}$$

mit der Definition der Flächendichte $n = \frac{N}{L^2}$ ergibt sich also:

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

b)

Eine Skizze des Verlaufes von der zweidimensionalen Zustandsdichte D(E) ist nicht nötig, da diese konstant ist.

$$D(E) = \frac{dN}{dE} = \frac{d}{dE}\left(\frac{mL^2}{\pi\hbar^2}E\right) = \frac{mL^2}{\pi\hbar^2} = const.$$

Es ist weiterhin zu zeigen, wie sich die Fermi-Energie (chemisches Potential) im Temperaturverlauf ändert. Wir müssen beachten, dass für den Fall $T \neq 0\,\mathrm{K}$ die Fermikugel nicht mehr durch eine Sprungfunktion beschrieben werden kann, sondern in ihre bewährte Form, die Fermi-Dirac-Verteilung, übergeht. Dann erhalten wir anstatt der einfachen Form πk_F^2, welches die Fläche beschrieben hatte den folgenden Ausdruck für N

$$N = 2 \cdot \frac{1}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2} \int d^2k \frac{1}{e^{\beta(E-\mu)} + 1}$$

mit $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ für das freie Elektronengas und Polarkoordinaten folgt:

$$N = \frac{L^2}{2\pi^2} \int_0^\infty dk\, k \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{1}{e^{\beta\left(\frac{\hbar^2}{2m}k^2 - \mu\right)} + 1}$$

die Winkelintegration kann sofort ausgeführt werden, während wir das restliche Integral mit Hilfe von Mathematica lösen:

$$N = \frac{L^2}{\pi} \cdot m \frac{\ln\left(1 + e^{\mu\beta}\right)}{\beta\hbar^2}$$

Dies können wir nun nach μ umstellen:

$$\mu(T) = k_B T \ln\left(e^{\frac{N\pi\hbar^2}{L^2 m k_B T}} - 1\right)$$

c)

Wir betrachten den Shockley Oberflächenzustand $n = 0$ der Cu (111) Oberfläche mit der Bindungsenergie $E_b = 0.45\,\mathrm{eV}$ bei $k_\| = 0$, wobei die effektive Masse $m^* = 0.4 \cdot m_e$ beträgt. Es ist die Zahl an $n = 0$ Elektronen pro Oberflächenatom zu berechnen. Wir bestimmen zuerst die Elektronendichte (Oberflächendichte), wobei wir N bestimmen können über

$$N = 2\frac{\pi k_F^2}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2}$$

für diesen Fall ist $k_F^2 = \frac{2m^* E_b}{\hbar^2}$, dies führt auf:

$$N = \frac{L^2 m^* E_b}{\pi\hbar^2}$$

was eine Elektronendichte von:

$$n_{e^-} = \frac{m^* E_b}{\pi\hbar^2}$$

liefert. Um die Dichte der Cu-Oberflächenatome bestimmen zu können, müssen wir deren Struktur betrachten. Wir haben eine fcc Struktur die entlang der (111) Richtung geschnitten wird. Dies liefert (vgl.

Übungsblatt 2) eine hexagonale Struktur. Jedes der 3 die Elementarzelle bildene Atome ist Teil von 6 anderen Zellen. Somit erhalten wir $N = \frac{1}{2}$ für die Elementarzelle, während die Fläche der Elementarzelle über die Fläche eines gleichseitigen Dreiecks berechnet werden kann als $A = \frac{d^2}{4}\sqrt{3}$, wobei $d = \frac{\sqrt{2}}{2}a$ für diesen Fall gilt. Somit erhalten wir für die Cu-Oberflächenatomdichte:

$$n_{Cu} = \frac{N}{A} = \frac{1}{2} \cdot \frac{8}{\sqrt{3}a^2} = \frac{4}{\sqrt{3}a^2}$$

Jetzt können wir direkt einsetzen, um die Elektronenanzahl pro Oberflächenatom zu erhalten:

$$\frac{n_e}{n_{Cu}} = \frac{\sqrt{3}a^2 m^* E_b}{4\pi\hbar^2} = \frac{\sqrt{3}a^2 m_e E_b}{10\pi\hbar^2} = 0.0424$$

D.h. im Durchschnitt besitzt nur jedes 23.6te Cu-Atom ein Elektron im $n = 0$ Zustand.

6.3 (Bandlücken)

skipped