WALTHER–MEISSNER–INSTITUT 23. Dezember 2010
für Tieftemperaturforschung
Bayerische Akademie der Wissenschaften
Prof. Dr. Rudolf Gross, PD Dr. Dietrich Einzel, Dr. Rudi Hackl
Tel.: 089 289 14218 **Blatt 10**

Übungsaufgaben zur

Festkörperphysik I, WS 2010/2011

7 Das freie Elektronengas

7.1 Fermi–Gase in d Dimensionen

Geben Sie für ein d–dimensionales Fermigas die Fermi–Wellenzahl $k_{\mathrm{F}d}$, die Fermi–Geschwindigkeit $v_{\mathrm{F}d}$, die Fermi–Energie $E_{\mathrm{F}d}$ und die Zustandsdichte an der Fermikante $N_{\mathrm{F}d}$ für beide Spinprojektionen an und zeigen Sie, dass die Relationen

$$N_{\mathrm{F}d} v_{\mathrm{F}d}^2 \quad = \quad d\frac{n_d}{m} \quad ; \quad N_{\mathrm{F}d}\epsilon_{\mathrm{F}d} = \frac{d}{2} n_d$$

gelten, wobei $n_d = N/L^d$ die Teilchendichte in d Dimensionen ist.

7.2 Chemisches Potential in zwei Dimensionen

Zeigen Sie, dass das chemische Potential eines Fermi-Gases in zwei Dimensionen gegeben ist durch

$$\mu(T) \quad = \quad k_{\mathrm{B}}T \, \ln\left[\exp\left(\frac{\pi n \hbar^2}{m k_{\mathrm{B}} T}\right) - 1\right] \quad , \tag{1}$$

wobei n die Anzahl der Elektronen pro Flächeneinheit ist. Beachten Sie, dass die Zustandsdichte pro Flächeneinheit eines zweidimensionalen Elektronengases nicht von der Energie abhängt ($N_2(\epsilon_{\mathbf{k}}) = m/\pi\hbar^2$ =const.)!

7.3 Mittlere Energie, Druck und Kompressibilität eines zweidimensionalen Fermi–Gases

1. Berechnen Sie die mittlere Energie $\langle E\rangle = U/N$ eines Elektrons in einem zweidimensionalen freien Elektronengas bei $T = 0$.

2. 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:

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

Welchen Fermi-Druck besitzt ein zweidimensionales Elektronensystem bei $T = 0$?

3. Bestimmen Sie die isotherme Kompressibilität

$$\kappa_T = -\frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_{T} .$$

Diese gibt Auskunft über die relative Änderung der Fläche A des zweidimensionalen Systems, welche durch eine infinitesimale Änderung des Druckes bei konstanter Temperatur bewirkt wird.

Blatt 10 wird in der Woche vom 10. - 14. Januar 2011 besprochen.

Frohe Weihnachten und alles Gute für das Jahr 2011 !

WALTHER–MEISSNER–INSTITUT 23. Dezember 2010
für Tieftemperaturforschung
Bayerische Akademie der Wissenschaften
Prof. Dr. Rudolf Gross, PD Dr. Dietrich Einzel, Dr. Rudi Hackl
Tel.: 089 289 14218 **Blatt 10**

Lösungen der Übungsaufgaben zur

Festkörperphysik I, WS 2010/2011

7 Das freie Elektronengas

7.1 Fermi–Gase in d Dimensionen

Wir gehen aus von einem d–dimensionalen Hyperkubus mit der Kantenlänge L und dem Volumens L^d. Die erlaubten Quantenzustände sind charakterisiert durch diskrete Wellenzahlen, die unter der Annahme periodischer Randbedingungen die Form

$$k_i = \left(\frac{2\pi}{L}\right) n_i \quad ; \quad i = 1, 2, \ldots d$$

haben. Wir müssen, wie früher im Abschnitt über Phononen, Summen $S\{f\}$ über Wellenvektoren auswerten:

$$\begin{aligned}
S\{f\} &\equiv \sum_{\mathbf{k}\sigma} f(\mathbf{k}) = \sum_{\sigma} \sum_{n_1, n_2, \ldots n_d} f\left(\frac{2\pi}{L}\mathbf{n}\right) \\
&= \sum_{\sigma} \int d^d n f\left(\frac{2\pi}{L}\mathbf{n}\right) = \sum_{\sigma} \left(\frac{L}{2\pi}\right)^d \int d^d k f(\mathbf{k}) \\
&= \sum_{\sigma} \left(\frac{L}{2\pi}\right)^d \underbrace{\int_0^\infty dk k^{d-1}}_{\text{Betrag}} \underbrace{\int d^{d-1}\Omega_{\mathbf{k}}}_{\text{Winkel}} f(\mathbf{k}) \\
&= \sum_{\sigma} \left(\frac{L}{2\pi}\right)^d S_d \int_0^\infty dk k^{d-1} \int \frac{d^{d-1}\Omega_{\mathbf{k}}}{S_d} f(\mathbf{k})
\end{aligned}$$

Hier bezeichnet $S_d = dV_d$ die Oberfläche der d–dimensionalen Einheitskugel, V_d ist ihr Volumen. Die bekannten Spezialfälle hiervon lauten für die Dimensionen $d = 1, \ldots, 4$

d	S_d	V_d
1	2	2
2	2π	π
3	4π	$\frac{4}{3}\pi$
4	$2\pi^2$	$\frac{\pi^2}{2}$

Um zu lernen, wie die Größen S_d und V_d im allgemeinen Fall von der Dimension d abhängen, bemüht man am besten einen Theoretiker. Der weist natürlich sofort darauf hin, dass im Jahre 1730 der Mathematiker Leonhard Euler die nach ihm benannte Γ–Funktion erfunden hat, welche die für unsere Zwecke sehr interesanten Eigenschaften hat:

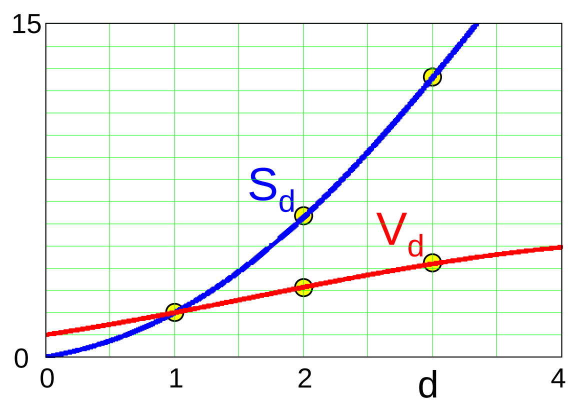
$$\begin{aligned}
\Gamma(z) &= \int_0^\infty dt t^{z-1} \mathrm{e}^{-t} \\
\Gamma(z+1) &= z\Gamma(z) = z! \\
\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) &= \sqrt{\pi} \\
\Gamma\left(n+\frac{1}{2}\right) &= \frac{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdot 7 \ldots (2n-1)}{2^n} \Gamma\left(\frac{1}{2}\right)
\end{aligned}$$

Wertet man nämlich $\Gamma(z)$ für $z = d/2 + 1$ aus, so findet man $\Gamma(3/2) = \sqrt{\pi}/2$, $\Gamma(4/2) = 1$, $\Gamma(5/2) = 3\sqrt{\pi}/4$, u.s.w. Damit lassen sich sowohl S_d als auch V_d wie folgt für beliebige Dimension d konstruieren:

$$S_d = \int d^{d-1}\Omega = \frac{d\pi^{\frac{d}{2}}}{\Gamma\left(\frac{d}{2}+1\right)}$$

und

$$V_d = \frac{S_d}{d} = \frac{\pi^{\frac{d}{2}}}{\Gamma\left(\frac{d}{2}+1\right)}$$



Im nun Folgenden gehen wir aus vom Spektrum freier Fermionen:

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} = \xi_{\mathbf{k}} + \mu$$

Die Summen über Wellenvektoren können nun wie folgt in Integrale über die Energien $\epsilon_{\mathbf{k}}, \xi_{\mathbf{k}}$ umgewandelt werden:

$$\begin{aligned} S\{f\} &= L^d \int_0^\infty d\epsilon_{\mathbf{k}} \underbrace{S_d \sum_\sigma \frac{m(2m\epsilon_{\mathbf{k}})^{\frac{d}{2}-1}}{(2\pi\hbar)^d}}_{N_d(\epsilon_{\mathbf{k}})} \int \frac{d^{d-1}\Omega_{\mathbf{k}}}{S_d} f(\mathbf{k}) \\ &= L^d \int_{-\mu}^\infty d\xi_{\mathbf{k}} \underbrace{S_d \sum_\sigma \frac{m[2m(\mu+\xi_{\mathbf{k}})]^{\frac{d}{2}-1}}{(2\pi\hbar)^d}}_{N_d(\mu+\xi_{\mathbf{k}})} \int \frac{d^{d-1}\Omega_{\mathbf{k}}}{S_d} f(\mathbf{k}) \end{aligned}$$

Man erkennt sofort, dass sich die Zustandsdichte (DOS) für 2 Spinprojektionen wie folgt auf d Dimensionen verallgemeinern lässt:

$$N_d(\mu+\xi_{\mathbf{k}}) = 2S_d \frac{m[2m(\mu+\xi_{\mathbf{k}})]^{\frac{d}{2}-1}}{(2\pi\hbar)^d}$$

Ein Spezialfall hiervon ist die DOS an der Fermikante:

$$N_{\mathrm{F}d} \equiv N_d(\mu) = 2S_d \frac{m[2m(\mu)]^{\frac{d}{2}-1}}{(2\pi\hbar)^d}$$

Damit lassen sich die Summen über Wellenzahlen $S\{f\}$ wie folgt umschreiben ($s = S/L^d$)

$$s\{f\} \equiv \frac{S\{f\}}{L^d} = \int_{-\mu}^\infty d\xi_{\mathbf{k}} N_d(\mu+\xi_{\mathbf{k}}) \int \frac{d^{d-1}\Omega}{S_d} f(\mathbf{k})$$

Beispiele für $N_d(\mu+\xi_{\mathbf{k}})$ sind in der folgenden Tabelle zusammengefasst

d	$N_d(\mu+\xi_{\mathbf{k}})$
1	$\frac{2m}{\pi\hbar}\frac{1}{\sqrt{2m(\mu+\xi_{\mathbf{k}})}}$
2	$\frac{m}{\pi\hbar^2}$
3	$\frac{m\sqrt{2m(\mu+\xi_{\mathbf{k}})}}{\pi^2\hbar^3}$

Einige wichtige Beziehungen sind im Folgenden aufgelistet:

1. Teilchenzahldichte in d Dimensionen:

$$n_d = \frac{N}{L^d}$$

2. Fermi–Wellenzahl $k_{\mathrm{F}d}$ in d Dimensionen:

$$\begin{aligned} n_d &= \frac{1}{L^d}\sum_{\mathbf{k}\sigma}\Theta(k_{\mathrm{F}d}-k) = 2\left(\frac{k_{\mathrm{F}d}}{2\pi}\right)^d V_d \quad \rightarrow \\ k_{\mathrm{F}d} &= \left\{\frac{1}{2}\frac{(2\pi)^d}{V_d}n_d\right\}^{\frac{1}{d}} \end{aligned}$$

3. Fermigeschwindigkeit $v_{\mathrm{F}d}$ in d Dimensionen:

$$v_{\mathrm{F}d} = \frac{\hbar k_{\mathrm{F}d}}{m}$$

4. Fermienergie $E_{\mathrm{F}d}$ in d Dimensionen:

$$E_{\mathrm{F}d} = \frac{\hbar^2 k_{\mathrm{F}d}^2}{2m}$$

Der Zusammenhang zwischen $N_{\mathrm{F}d}$, $v_{\mathrm{F}d}$ und $E_{\mathrm{F}d}$ lautet dann allgemein:

$$\begin{aligned} N_{\mathrm{F}d}v_{\mathrm{F}d}^2 &= d\frac{n_d}{m} \\ N_{\mathrm{F}d}E_{\mathrm{F}d} &= \frac{d}{2}n_d \end{aligned}$$

7.2 Chemisches Potential in zwei Dimensionen

Mit dem Resultat von Aufgabe 7.1 kann man für den Fall $d=2$ schreiben

$$\begin{aligned} n &= \frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k}\sigma} n_{\mathbf{k}} = \int_0^\infty d\epsilon_{\mathbf{k}} \underbrace{N_2(\epsilon_{\mathbf{k}})}_{m/\pi\hbar^2} n_{\mathbf{k}} \\ &= \frac{m}{\pi\hbar^2}\int_0^\infty \frac{d\epsilon_{\mathbf{k}}}{\mathrm{e}^{\frac{\epsilon_{\mathbf{k}}-\mu(T)}{k_\mathrm{B}T}}+1} \end{aligned}$$

Das Integral ist tabelliert und man findet

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \frac{dx}{b+c\mathrm{e}^{ax}} &= \lim_{x_0\to\infty}\left\{\frac{x}{b}-\frac{1}{ab}\ln\left(b+c\mathrm{e}^{ax}\right)\right\}_0^{x_0} \\ &= \lim_{x_0\to\infty}\left\{\frac{x_0}{b}-\frac{1}{ab}\ln\left(b+c\mathrm{e}^{ax_0}\right)\right\} - \left[-\frac{1}{ab}\ln(b+c)\right] \\ &= \frac{1}{ab}\left[\ln(b+c)-\ln c\right] \end{aligned}$$

In unserem Fall ist $a = 1/k_\mathrm{B}T$, $b=1$, $c = \exp[-\mu(T)/k_\mathrm{B}T]$ und wir erhalten

$$n = \frac{m}{\pi\hbar^2}\int_0^\infty \frac{d\epsilon_{\mathbf{k}}}{\mathrm{e}^{\frac{\epsilon_{\mathbf{k}}-\mu(T)}{k_\mathrm{B}T}}+1} = \frac{m}{\pi\hbar^2}\left\{\mu(T)+k_\mathrm{B}T\ln\left(1+\mathrm{e}^{-\frac{\mu(T)}{k_\mathrm{B}T}}\right)\right\}$$

Diese Gleichung lässt sich nach $\exp(\mu(T)/k_\mathrm{B}T)$ auflösen

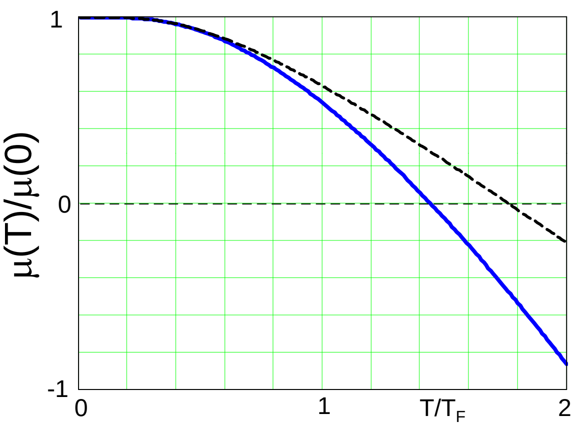
$$\begin{aligned} \frac{n\pi\hbar^2}{mk_\mathrm{B}T} - \frac{\mu(T)}{k_\mathrm{B}T} &= \ln\left(1+\mathrm{e}^{-\frac{\mu(T)}{k_\mathrm{B}T}}\right) \\ \mathrm{e}^{-\frac{\mu(T)}{k_\mathrm{B}T}} &= \frac{1}{\mathrm{e}^{\frac{n\pi\hbar^2}{mk_\mathrm{B}T}}-1} \end{aligned}$$

und man erhält schließlich als Resultat

$$\mu(T) = k_{\rm B}T \ln\left(\mathrm{e}^{\frac{n\pi\hbar^2}{mk_{\rm B}T}} - 1\right)$$

Mithilfe der Beziehung $N_{\rm F2}E_{\rm F2} \equiv n_2$ lässt sich dieses Ergebnis noch wie folgt umschreiben

$$\begin{aligned}\mu(T) &= k_{\rm B}T \ln\left(\mathrm{e}^{\frac{E_{\rm F2}}{k_{\rm B}T}} - 1\right) = k_{\rm B}T \ln\left(\mathrm{e}^{\frac{\mu(0)}{k_{\rm B}T}} - 1\right) = \mu(0)\frac{T}{T_{\rm F}} \ln\left(\mathrm{e}^{\frac{T_{\rm F}}{T}} - 1\right)\\ &= \mu(0)\left\{1 - \frac{T}{T_{\rm F}}\left(\mathrm{e}^{-\frac{T_{\rm F}}{T}} + \frac{1}{2}\mathrm{e}^{-\frac{2T_{\rm F}}{T}} + \frac{1}{3}\mathrm{e}^{-\frac{3T_{\rm F}}{T}} + \frac{1}{4}\mathrm{e}^{-\frac{4T_{\rm F}}{T}} + \ldots\right)\right\}\end{aligned}$$



Die obige Figur zeigt die Temperaturabhängigkeit des normierten chemischen Potentals $\mu(T)/\mu(0)$. Die gestrichelte Kurve ist die führende Korrektur zum Tieftemperaturlimes $\propto 1 - (T/T_{\rm F})\exp(-(T_{\rm F}/T))$.

7.3 Mittlere Energie, Druck und Kompressibilität eines zweidimensionalen Fermi–Gases

1. Wir berechnen zunächst die innere Energie U des Elektronensystems:

$$\begin{aligned}U &= \sum_{\mathbf{k}\sigma}\epsilon_{\mathbf{k}} = \frac{L^2}{(2\pi)^2}\sum_{\sigma}\int d^2k\epsilon_{\mathbf{k}}\\ &\overset{L^2=A}{=} 2\frac{A}{(2\pi)^2}\int_0^{k_{\rm F}} dk 2\pi k\frac{\hbar^2k^2}{2m} = 2\frac{A}{2\pi}\frac{\hbar^2}{2m}\frac{k_{\rm F}^4}{4}\\ &= \frac{A}{4\pi}\frac{\hbar^2}{2m}k_{\rm F}^4 = \epsilon_{\rm F}\frac{Ak_{\rm F}^2}{4\pi}\end{aligned}$$

Die Fermi–Wellenzahl k_{F} kann bestimmt werden aus

$$\begin{aligned} N &= \sum_{\mathbf{k}\sigma} \Theta(k_{\mathrm{F}} - |\mathbf{k}|) = 2\frac{A}{(2\pi)^2}\int_0^{k_{\mathrm{F}}} dk 2\pi k \\ &= 2\frac{A}{2\pi}\frac{k_{\mathrm{F}}^2}{2} = \frac{A}{2\pi}k_{\mathrm{F}}^2 \\ n_2 &= \frac{N}{A} = \frac{k_{\mathrm{F}}^2}{2\pi} \quad \rightarrow \quad k_{\mathrm{F}}^2 = 2\pi\frac{N}{A} = 2\pi n_2 \\ k_{\mathrm{F}} &= \sqrt{2\pi n_2} \end{aligned}$$

Damit lässt sich die Fermi–Energie in der Form

$$\epsilon_{\mathrm{F}2} = \frac{\hbar^2}{2m}2\pi n_2$$

schreiben. Mit diesen Ergebnissen können wir die mittlere Energie $\langle E\rangle$ der Elektronen schreiben als

$$\langle E\rangle = \frac{U}{N} = \epsilon_{\mathrm{F}2}\frac{Ak_{\mathrm{F}}^2}{4\pi}\frac{2\pi}{Ak_{\mathrm{F}}^2} = \frac{\epsilon_{\mathrm{F}2}}{2}$$

2. Mit der inneren Energie

$$U = \epsilon_{\mathrm{F}2}\frac{Ak_{\mathrm{F}}^2}{4\pi} = \pi\frac{\hbar^2}{2m}\frac{N^2}{A}$$

erhalten wir den Druck p für ein zweidimensionales System

$$p = -\left(\frac{\partial U}{\partial A}\right)_{S,N} = \pi\frac{\hbar^2}{2m}\frac{N^2}{A^2} = \frac{1}{2}\underbrace{2\pi\frac{\hbar^2}{2m}n_2}_{=\epsilon_{\mathrm{F}2}} n_2 = \frac{1}{2}\epsilon_{\mathrm{F}2}n_2 \equiv \frac{U}{A}$$

3. Aus der Abängigkeit $p(A)$ können wir als nächsten Schritt die isotherme Kompressibilität κ_T und das Kompressionsmodul $B = \kappa_T^{-1}$ berechnen:

$$\begin{aligned} \kappa_T &= -\frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T \equiv \frac{1}{B} \\ B &= -V\left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_T = -A\left(\frac{\partial p}{\partial A}\right)_T \\ &= -A\frac{\partial}{\partial A}\left[\frac{1}{2}\epsilon_{\mathrm{F}2}\frac{N}{A}\right] = -A\left[\frac{1}{2}\frac{\partial \epsilon_{\mathrm{F}2}}{\partial A}\frac{N}{A} + \frac{1}{2}\epsilon_{\mathrm{F}2}\frac{\partial}{\partial A}\frac{N}{A}\right] \end{aligned}$$

Nun ist

$$\frac{\partial \epsilon_{\mathrm{F}2}}{\partial A} = \frac{\hbar^2}{2m}2\pi\frac{\partial}{\partial A}\frac{N}{A} = -\frac{\hbar^2}{2m}2\pi\frac{N}{A^2} = -\frac{\epsilon_{\mathrm{F}2}}{A}$$

und man bekommt

$$\begin{aligned} B &= -A\left[\frac{1}{2}(-)\frac{\epsilon_{\mathrm{F}2}}{A}\frac{N}{A} + \frac{1}{2}\epsilon_{\mathrm{F}2}(-)\frac{N}{A^2}\right] \\ &= A\left[\epsilon_{\mathrm{F}2}\frac{N}{A^2}\right] = \epsilon_{\mathrm{F}2}\frac{N}{A} = \epsilon_{\mathrm{F}2}n_2 \equiv 2p \end{aligned}$$

Damit kann man für die isotherme Kompressibilität schreiben

$$\kappa_T = \frac{1}{B} = \frac{1}{\epsilon_{\mathrm{F}2}n_2} = \frac{1}{2p}$$