Übungen zur Festkörperphysik I

Lösungen zu Serie 6

1 Die Fermi-Dirac-Verteilung

a) Mit $x = \frac{E-\mu}{k_B T}$ ergibt sich für die Fermi-Dirac-Verteilung

$$f(x) = \frac{1}{e^x + 1}$$

aufgelöst nach x:

$$x = \ln \frac{1 - f(x)}{f(x)}$$

Setzt man $f(x) = 0.9$ bzw. $f(x) = 0.1$ ergibt sich:

$$\Delta x = 4 \ln 3 \approx 4.4 \Rightarrow \Delta E_{0.9,0.1} = 4.4 k_B T$$

b) Die Abweichung der Maxwell-Boltzmann-Verteilung von der Fermi-Dirac-Verteilung sei c =1% bzw. 10%. Die Verteilungen lauten mit $x = \frac{E-\mu}{k_B T}$:

$$\begin{aligned} f_{\mathrm{FD}} &= (e^x + 1)^{-1} \\ f_{\mathrm{MB}} &= e^{-x} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} c &= \frac{f_{\mathrm{MB}} - f_{\mathrm{FD}}}{f_{\mathrm{FD}}} \\ &= \frac{e^{-x} - (e^x + 1)^{-1}}{(e^x + 1)^{-1}} \\ &= e^{-x}(e^x + 1) - 1 \\ &= e^{-x} \end{aligned}$$

Somit wird $x = -\ln c$, $x_{0.1} = 2.3$, $x_{0.01} = 4.6$. Es folgt:

$$(E - \mu)_{\mathrm{min}} = x k_B T$$

Eingesetzte Werte: (1 eV = $1.60217646 \cdot 10^{-19}$ J)
$T = 300$ K, $c = 10$ %: $(E - \mu)_{\mathrm{min}} \approx 59$ meV
$T = 300$ K, $c = 1$ %: $(E - \mu)_{\mathrm{min}} \approx 119$ meV
$T = 1000$ K, $c = 10$ %: $(E - \mu)_{\mathrm{min}} \approx 198$ meV
$T = 1000$ K, $c = 1$ %: $(E - \mu)_{\mathrm{min}} \approx 396$ meV

2 Dimensionsreduzierte Elektronensysteme

a) Dispersionsrelation für ein freies Elektron:$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ oder $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$. Für die Anzahl der Zustände gilt allgemein für Spin-1/2 Teilchen:

$$\mathrm{d}Z = 2\frac{L^D}{(2\pi)^D}\mathrm{d}^D k$$

da jeder Zustand im k-Raum das Volumen $\frac{(2\pi)^D}{L^D}$ einnimmt und jeder Zustand mit zwei Elektronen besetzt werden kann (Faktor 2). Die Zustandsdichte ist gegeben durch

$$D(E) = \frac{1}{L^D}\frac{\mathrm{d}Z}{\mathrm{d}E}$$

Für $D = 2$ ergibt sich:

$$\begin{aligned}
Z(k) &= 2\frac{L^2}{(2\pi)^2}\int_0^k \mathrm{d}k' k' \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi \\
&= \frac{L^2 k^2}{2\pi} \\
&= \frac{L^2 m E}{\pi\hbar^2} \\
D(E) &= \frac{1}{L^2}\frac{\mathrm{d}Z}{\mathrm{d}E} \\
&= \frac{m}{\pi\hbar^2}
\end{aligned}$$

Für $D = 1$ ergibt sich:

$$\begin{aligned}
Z(k) &= 2\frac{L}{2\pi}\int_{-k}^{k} \mathrm{d}k' \\
&= \frac{2Lk}{\pi} \\
&= \frac{2L\sqrt{2mE}}{\pi\hbar} \\
D(E) &= \frac{1}{L}\frac{\mathrm{d}Z}{\mathrm{d}E} \\
&= \frac{\sqrt{2m}}{\pi\hbar\sqrt{E}}
\end{aligned}$$

Für $D = 0$ liegen die Energien nicht dicht. $D(E)$ ist eine Summe von Deltafunktionen:

$$D(E) = \sum_n \delta(E - E_n)$$

wobei E_n die Energieeigenwerte des 0-dim. Systems sind.

b) Für $D = 2$ gilt:

$$\begin{aligned} n &= \int_0^{E_F} D(E)\mathrm{d}E \\ &= \frac{m}{\pi\hbar^2} E_F \\ \Rightarrow k_F &= \sqrt{2\pi n} \end{aligned}$$

Für $D = 1$ gilt:

$$\begin{aligned} n &= \int_0^{E_F} D(E)\mathrm{d}E \\ &= \frac{2\sqrt{2m}}{\pi\hbar} \sqrt{E_F} \\ \Rightarrow k_F &= \frac{\pi n}{2} \end{aligned}$$

3 Flüssiges Helium

Allgemeine Form der Fermi-Energie E_F für Systeme von freien Fermionen mit Spin s und Masse m:

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{6\pi^2}{2s+1} \frac{N}{V} \right)^{\frac{2}{3}}$$

^{3}He ist ein Fermion mit $s = \frac{1}{2}$. Die Masse von ^{3}He beträgt 3 g/mol oder für 1 Atom $m = 4.98 \cdot 10^{-27}$ kg. $\frac{N}{V} = \frac{N_A}{V_A} = 1.63 \cdot 10^{28}$ m^{-3}.

$$E_F = 6.86 \cdot 10^{-23} \text{ J}$$

$$T_F = 4.96\text{K}$$

Vergleich mit Natrium:

$$E_F = 5.2 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$

$$T_F = 37600 \text{ K}$$

4 $CeAl_3$ - ein Schwer-Elektronen Metall

a) $CeAl_3$ hat eine hexagonale Ni_3Sn-Struktur, so dass jede primitive Einheitszelle zwei chemische Formeleinheiten von $CeAl_3$ enthält. Jedes Atom ist zudem dreiwertig. Die Anzahl der Elektronen pro Kubiknanometer ist somit:

$$n_s = 2 \cdot 12 / V_{\mathrm{EZ}} = 140 \text{ nm}^{-3}$$

wobei $V_{\mathrm{EZ}} = ca^2 \sin 60^\circ = 0.171$ nm^3. Die Fermi-Wellenzahl k_F beträgt somit:

$$k_F = (3\pi^2 n_s)^{\frac{1}{3}} = 16.1 \text{ nm}^{-1}$$

und die Fermi-Temperatur T_F

$$T_F = \frac{E_F}{k_B} = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2 m_e k_B} = 1.14 \cdot 10^5 \text{ K}.$$

Die spezifische Wärme pro mol $CeAl_3$ (d.h. 12 mol Elektronen) beträgt:

$$\gamma = 12\left(\frac{\pi}{12}\frac{N_A k_B^2}{E_F}\right) = 12\left(\frac{\pi^2}{2}\frac{N_A k_B}{T_F}\right) = 4.3 \text{ mJ mol}^{-1}\text{ K}^{-2}$$

und die Pauli Susceptibilität pro mol $CeAl_3$ (d.h. 12 mol Elektronen) ist

$$\chi = 12\left(\frac{3N_A\mu_0\mu_B^2}{2k_B T_F}\right) \approx 5.9\cdot 10^{-5}\text{ cm}^3\text{ mol}^{-1}.$$

b) Experimentell findet man für $CeAl_3$ unterhalb 0.3 K, dass die spezifische Wärme und die magnetische Suszeptibilität qualitativ von metallischem Typ sind, aber die beobachteten Werte für γ und χ sind fast 1000 mal grösser als erwartet. Dies ist ein Hinweis, dass in $CeAl_3$, bei sehr tiefen Temperaturen ein neuer metallischer Zustand auftritt, der Elektronen mit "riesiger" effektiver Masse $m^\star$ beinhaltet. Mit einem schweren Elektron pro chemische Formeleinheit $CeAl_3$ findet man folgendes. Anzahl schwerer Elektronen pro Kubiknanometer:

$$n_{\text{Schwer}} = \frac{2}{V_{\text{EZ}}} = 11.7\text{ nm}^{-3}$$

Fermi-Wellenvektor

$$k_F = (3\pi^2 n_{\text{Schwer}})^{\frac{1}{3}} = 7\text{ nm}^{-1}$$

Wir berechnen die Fermi-Temperatur aus den experimentellen Daten γ und χ:

$$T_F = \frac{\pi^2}{2}\frac{N_A k_B}{\gamma} \approx 25\text{ K}$$

$$T_F = \frac{3N_A\mu_0\mu_B^2}{2k_B\chi} \approx 15\text{ K}$$

Nehmen wir $T_F \approx 20$ K (den Durchschnittswert), so erhalten wir für die effektive Masse der schweren Elektronen

$$T_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m^\star k_B}$$

$$\Rightarrow \frac{m^\star}{m_e} = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m_e k_B T_F} \approx 1080$$

Die Resultate für γ und χ sind miteinander konsistent. Weil die "riesige" effektive Masse $m^\star$ der schweren Elektronen durch sehr starke elektronische Korrelationen hervorgerufen wird, ist es merkwürdig, dass sich dieser ungewöhnliche metallische Zustand mit einem sehr einfachen Modell (das freie Elektronengas mit einem angepasstem Parameter $m^\star$) beschreiben lässt.

ANHANG: Daten des Standardmetalls

(Auszug aus Busch und Schade, Vorlesungen über Festkörperphysik, S. 475)

Zum Zweck eines Vergleichs mit den Daten realer Metalle hat A.B Pippard (Rep. Prog.Phys. 23 176 (1960)) aufgrund des Modells freier Elektronen Daten eines idealisierten Metalls angegeben. Dabei wird die Elektronenkonzentration $n = 6.0 \cdot 10^{22}$ cm^{-3} angenommen (dies entspricht einem Atomvolumen A/ρ von ungefähr 10 cm^3 für ein einwertiges Metall). Für $T = 0$ K ergeben sich folgende Werte:

Fermi-Energie

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m_e}(3\pi^2 n)^{\frac{2}{3}} = 5.59 \text{ eV}$$

Entartungs- und Fermitemperatur

$$T_E = \frac{2}{5}T_F = \frac{E_F}{k_B} = 25900 \text{ K}$$

Radius der Fermi-Kugel

$$k_F = k(E_F) = (3\pi^2 n)^{\frac{1}{3}} = 1.21 \cdot 10^8 \text{cm}^{-1}$$

Zustandsdichte an der Fermikante pro Vol.einheit (inkl. Spinentartung)

$$D(E_F) = \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m_e}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}\frac{1}{E_F} = \frac{mk_F}{\hbar^2\pi^2} = 0.805 \cdot 10^{22} \text{ eV}^{-1} \text{ cm}^{-3}$$

Spezifische Wärme der Elektronen pro Vol.einheit

$$c_V^{el} = \frac{2}{3}\pi^2 k_B^2 D(E_F)T = \gamma T = 393 \cdot 10^{12}\ T \text{ eV cm}^{-2} \text{ K}^{-1}$$

Fermi-Geschwindigkeit

$$v_F = \frac{\hbar k_F}{m_e} = 1400 \text{ km s}^{-1}$$

Oberfläche der Fermi-Kugel

$$S = 4\pi k_F^2 = 1.84 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-2}$$

Maximaler Querschnitt der Fermi-Kugel

$$A_{\max} = \frac{S}{4} = 4.61 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-2}$$

Zyklotronfrequenz der Elektronen im Magnetfeld H[A/cm]

$$\omega_e = \frac{e}{m_e}B \approx \frac{2\mu_B}{\hbar}\mu_0 H = 2.21 \cdot 10^7\ H \text{ rad s}^{-1}$$

Radius der klassischen Zyklotronbahnen der Elektronen an der Fermikante

$$R_e = \frac{v_F}{\omega_e} = \frac{6.33}{H} \text{ cm}$$

Elektrische Leitfähigkeit der Elektronen mit der freien Weglänge Λ[cm]

$$\sigma = \frac{ne^2}{m_e v_F}\Lambda = 1.21 \cdot 10^1 1\ \Lambda\ \Omega^{-1} \text{ cm}^{-1}$$